



دانشکده مهندسی مکانیک رشته مهندسی مکانیک گرایش طراحی کاربردی رساله دکتری

تحلیل خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای فلزی تقویت شده با نانولوله و گرافن به روش شبیهسازی دینامیک مولکولی

نگارنده: رضا رضائی

اساتید راهنما: دکتر محمود شریعتی دکتر حسین توکلی عنبران دکتر چوانگ دنگ

شماره:		-QL
تاريخ:	باسمه تعالى	المنافقة المراجع
ويرايش:		مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره ۱۲: صورت جلسه نهایی دفاع از رساله دکتری (Ph.D) (ویژه دانشجویان ورودی های ۹۴ و ما قبل)

بدینوسیله گواهی می شود آقای رضا رضایی دانشجوی دکتری رشته مهندسی مکانیک به شماره دانشجویی ۹۰۲۲۶۰۵ ورودی مهر ماه سال ۱۳۹۰ در تاریخ ۱۳۹۵/۸/۲۰ از رساله نظری [۲] / عملی [] خود با عنوان : تحلیل خواص مکانیکی نانوکامپوزیت های فلزی تقویت شده با نانولوله و گرافن به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی دفاع و با اخذ نمره . [۸۸ ۸۸ به درجه : معلوی س. نانل گردید.

> الف) درجه عالی: نمره ۲۰–۱۹ □ ب) درجه بسیار خوب: نمره ۱۸/۹۹ – ۱۷ ₪ ج) درجه خوب: نمره ۱۶/۹۹–۱۵ □ د) غیر قابل قبول و نیاز به دفاع مجدد دارد □ ه) رساله نیاز به اصلاحات دارد □ .

رديف.	هيئت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
, ''	دکٽر محمود شريعتي	استاد راهنما	استاد	21->>
٢	دکتر حسین توکلی عنبران	استاد راهنما	استاديار	
۲. 	دكتر مسعود طهانى	استاد مدعو خارجي	استاد	A
F	دکتر محمد محمدی اقدم	استاد مدعو خارجي	استاد	Capp
۵	دكتر روح اله توكلي	استاد مدعو خارجي	دانشيار	Stor
۶	دکتر سید هادی قادری	نمایندہ تحصیلات تکمیلی دانشکدہ	استاديار	0.05

مدیر محترم تحصیلات تکمیلی دانشگاه:

ضمن تأیید مراتب فوق مقرر فرمائید اقدامات لازم در خصوص انجام مراحل دانش آموختگی آقای رضا رضائی بعمل آید.

ر نام و نام خانوادگی رئیس <u>دانشکده :</u> و مر مر انشکده: تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:

تقديم به

به همسر گرامی و فرزند عزیزم.

از همسر گرامیام که در طول دوره تحصیلم همواره همراه و پشتیبانم بودهاند کمال تشکر و قدردانی را دارم.

همچنین از اساتید راهنما آقایان دکتر شریعتی، دکتر توکلی عنبران و دکتر دنگ که

مرا در انجام این پژوهش یاری فرمودند تشکر میکنم.

٥

تعهـ د نامه

اینجانب رضا رضائی دانشجوی دوره دکتری رشته مهندسی مکانیک – طراحی کاربردی دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده رساله تحلیل خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای فلزی تقویت شده با نانولوله و گرافن به روش شبیهسازی دینامیک مولکولی تحت راهنمایی دکتر محمود شریعتی، دکتر حسین توکلی عنبران و دکتر چوانگ دنگ متعهد می شوم.

- تحقيقات در اين پايان نامه توسط اينجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
 - در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی
 در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام «دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا «Shahrood University of Technology» به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایح اصلی پایان نامه تأثیر گذار بودهاند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده
 است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

تا*ر*یخ: امضای دانشجو :

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
 - استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیدہ

به دلیل خواص فوقالعادهای مانند استحکام و سفتی بالا که نانوساختارهای نانولوله و گرافن دارند از آنها برای تقویت خواص مکانیکی ماتریسهای فلزی استفاده می شود. از این رو، در پژوهش حاضر، رفتار و خواص مکانیکی نانوکامپوزیت-های فلزی تقویت شده با نانوساختارها با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. بدین منظور، سه نوع نانوساختار نانولولههای کربنی، نانولولههای نیترید بور و گرافن برای ترکیب با ماتریس فلزی به کار گرفته شد. علاوه بر فلزات بلوری، ساختار فلزی نسبتاً جدید شیشههای فلزی نیز در ماتریس نانوکامپوزیتها مورد بررسی قرار گرفت. در راستای اهداف رساله، ابتدا خواص مکانیکی و مکانیزم تغییر شکل نانوآلومینیم تک-کریستال به روش شبیه-سازی دینامیک مولکولی بررسی شد و سپس تأثیر نرخ کرنش و دمای سیستم در خواص مذبور به دست آمد. نتایج به دست آمده، مستقل بودن خواص از نرخ کرنش و وابستگی شدید آنها به دما را نشان میدهند. بعد از آن، از نانولولهی نیترید بور برای تقویت و بهبود خواص نانوآلومینیم استفاده شد. خواص مکانیکی و مکانیزم تغییر شکل نانوکامپوزیت تحت بارهای مختلف کششی و فشاری به دست آمدند. به علاوه این که، تأثیر کسر اتمی و قطر نانولوله در رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت مطالعه گردید. نتایج نشان می دهند که حضور نانولولهی نیترید بور بلند تأثیر قابل ملاحظهای در بهبود خواص مکانیکی دارد به طوری که استحکام کششی آن از ۴/۶۷ GPa برای ماتریس خالص به ۸/۳۸ برای نانوکامپوزیت با ./۸/۶ کسر اتمی نانولولهی بلند افزایش می یابد. مدول الاستیک آن نیز از ۵۲/۷ به GPa ۲۰۵ CP در بارگذاری کششی و از ۶۶/۸ به ۱۲۴ GPa در بارگذاری فشاری افزایش پیدا میکند. به علاوه این که تأثیر قطر نانولوله در خواص مکانیکی نانوکامپوزیت قابل ملاحظه نیست. اما کسر اتمی نانولوله تأثیر زیادی در خواص مذبور ایجاد می نماید به طوری که با افزایش کسر اتمی از ٪/۸/۶ به ٪۲۹/۷، استحکام کششی نانوکامپوزیت از ۸/۳۸ به ۲۵/۷ GPa افزایش می یابد.

در ادامه از صفحات بسیار قوی گرافن برای ترکیب با فلزات کریستالی به نام کامپوزیتهای نانولایهای استفاده گردید. مکانیزم تغییر شکل و تأثیر لایههای گرافن تحت بارگذاری فشاری بررسی گردید. همچنین تأثیر ضخامت لایههای فلزی در مکانیزم تغییر شکل کامپوزیت مورد بررسی قرار گرفت. براساس نتایج به دست آمده، لایههای گرافن مکانیزم تغییر شکل فلزات مس، طلا و نقره را از تشکیل و انتشار نابجایی به تغییر شکل دوقلویی تغییر میدهند و رفتارهای شبهالاستیک و حافظهی شکل را در کامپوزیتها موجب میشوند. ضخامت لایههای فلزی نیز ثأثیری زیادی در خواص مکانیکی و مکانیزم تغییر شکل کامپوزیتها ایفا می کنند؛ به طوری که، با افزایش ضخامت، استحکام فشاری کامپوزیت حدود ۲۰۰۶ بهبود مییابد و مکانیزم تغییر شکل کامپوزیت ها ایفا می کنند؛ به طوری که، با افزایش ضخامت، استحکام فشاری کامپوزیت حدود ۲۰۰۶ بهبود مییابد و مکانیزم تغییر شکل از کمانش برای ضخامتهای کم به تغییر شکل دوقلویی برای ضخامتهای زیاد به دلیل تأثیر حضور لایههای گرافن تغییر می از کمانش برای ضخامتهای کم به تغییر شکل دوقلویی برای ضخامتهای زیاد به دلیل تأثیر حضور لایههای گرافن تغییر مییابد. بعد از آن، از نانولولهی کربنی برای ترکیب با شیشهی فلزی Cu₆₄Zr₃₆ کیل تأثیر حضور لایههای گرافن استفاده شد. نتایج به دست آمده نشان میدهند که با افزودن نانولولهی کربنی بلند، خواص مکانیکی آن استفاده شد. نتایج به دست آمده نشان میدهند که با افزودن نانولولهی کربنی بلند، افزودن کسر اتمی ۱۱۸ کانیکی نانوکامپوزیت شیشهی فلزی شامل استحکام و مدول یانگ به طور قابل ملاحظهای بهبود میابد. با فزودن کسر اتمی ۱۱۸ نانولولهی کربنی، مدول یانگ به اندازه ۲۹۸ و استحکام تسلیم به اندازه ۲۵۵٪ در مقایسه با افزودن کسر اتمی ۱۱۸ نانولولهی کربنی، مدول یانگ به اندازه ۲۹۸ و استحکام تسلیم به اندازه ۲۵۵٪ در مقایسه با ماتریس خاص در بارگذاری کششی بهبود میابند. از این رو به منظور بهبود نرمی و چقرمگی آنها از لایههای بلند و کوتاه گرافن استفاده گردید. طولهای مختلف از ماتریس و همچنین طول و آرایشهای گوناگون از لایههای گرافن مورد بررسی گرافن استفاده گردید. طولهای مختلف از ماتریس و همچنین طول و آرایشهای گوناگون از لایههای گرافن مورد بررسی قرار گرفت. نتایج شبیه سازیهای محاول یا آرافن در مکانیزم تغییر شکل پلاستیک ماتریس قرار شرفی مورد برسی مول انشان می دهد. حضور این می شکل گرفت در مکانیزم تغییر شکل موضو می مورد بر سی را نشان می دهد. حضور این استفاده کرد می افزایش موده در نتیجه، با افزودن لایههای کوتاه کرده و تعداد محلهای موضعی مول و آرایش می می نازی و می را نیز به اندازهی ۱۸۰۰٪ بهبود بخشید. تریز و نرزی کرنش اعمالی را افزایش می هدند. در نتیجه، با افزودن لایههای کوتاه گرافن به ماتریس شیشه می ازی و ۱۰۱٪ بهبود بخسید.

کلمات کلیدی: فلز، شیشههای فلزی، نانوکامپوزیت، نانولولهی کربنی، نانولولهی نیترید بور، گرافن، دینامیک مولکولی

ليست مقالات مستخرج از رساله:

- Reza Rezaei, Hossein Tavakoli-Anbaran, Mahmoud Shariati, "Mechanical Characteristics and Failure Mechanism of Nano-single Crystal Aluminum based on Molecular Dynamics Simulations: Strain Rate and Temperature Effects", Journal of Solid Mechanics, 2016.
- 2- Reza Rezaei, Chuang Deng, Hossein Tavakoli-Anbaran and Mahmoud Shariati,
 "Deformation Twinning-mediated Pseudoelasticity in Metal–graphene Nanolayered Membrane", Philosophical Magazine Letters, Vol. 96, pp. 322-9, 2016.
- 3- Reza Rezaei, Mahmoud Shariati, Hossein Tavakoli-Anbaran and Chuang Deng, "Mechanical Characteristics of CNT-reinforced Metallic Glass Nanocomposites by Molecular Dynamics Simulations", Computational Materials Science, Vol. 19, pp. 19-26, 2016.
- 4- R. Rezaei, C. Deng, M. Shariati, H. Tavakoli-Anbaran, "The Ductility and Toughness Improvement in Metallic Glass through the Dual Effects of Graphene Interface", Journal of Materials Research, Vol. 32, Iss. 2, pp. 392-403, 2017.
- 5- Reza Rezaei, Hossein Tavakoli-Anbaran and Mahmoud Shariati, "Mechanical Properties and Deformation Mechanism of BNNT-Al Nanocomposite by Molecular Dynamics Simulations", in preparation process.

فهرست

ز		چکیده
ط	مستخرج از رساله	ليست مقالات
م	ها	فهرست شكله
ف	ها	فهرست جدول
١	مقدمه و مروری بر مطالعات قبلی	فصل اول:
١	۱–۱ مقدمه	
٣	۱–۲ فلزات بلوری	
۶	۱–۳ شیشههای فلزی	
14	۱–۴ نانوکامپوزیتهای فلزی	
۱۸	۵–۱ اهداف رساله ۵۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰	
۲۱	مبانی روش شبیهسازی دینامیک مولکولی	فصل دوم:
۲۱	۲-۱ مقدمه	
٢٢	۲–۲ پتانسیلهای برهمکنش	
78	۲–۳ موقعیّتهای اوّلیه	
۲۷	۲-۴ سرعتهای اوّلیه	
۳۰	۔ ۲–۵ شرایط مرزی تناوبی	
٣٢	- ۲-۶ کاهش زمان محاسبه: فاصله برش	
٣٣	۲-۷ کنترل دما و فشار در شبیهسازی دینامیک مولکولی ۲۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰	
٣٩	 -۸ معادله ی حرکت و الگوریتم دینامیک مولکولی	
41	۲-۹ محاسبهی تنش در شبیهسازی دینامیک مولکولی	
47	تحليل رفتار مكانيكي نانوفلزات بلوري و نانوكامپوزيتهاي فلزي بلوري تقويت شده	فصل سوم:
۴۳	۳–۱ مقدمه	
44	٣-٢ تحليل رفتار مكانيكي و تغيير شكل آلومينيم	
44	۳-۲-۳ مقدمه	
۴۵	۳–۲–۲ تابع پتانسیل و آماده سازی نمونهی آزمایش ۲۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰	
41	۳-۲-۳ تأثیر نرخ کرنش	
49	۳-۲-۳ تأثیر دما	
۵١	۳–۲–۵ مکانیزم تغییر شکل	
۵۴	۲-۲-۴ نتیجه گیری	
۵۵	۳-۳ شبیهسازی نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانولولهی نیترید بور	
۵۵	۳-۳-۱ مقدمه	
۵۶	۳–۳–۲ مدلسازی نمونههای آزمایش	
۵٨	۳-۳-۳ تأثیر نانولولهی نیترید بور بلند	
۵٩	۳-۳-۴ تأثیر نانولولهی نیترید بور کوتاه۳	
۶.	۳-۳-۵ تأثیر کسر اتمی	
97	۳-۳-۶ تأثير قطر نانولوله	

94	۳-۳-۷ مکانیزم تغییر شکل	
۶٨	۲-۳-۸ نتیجه گیری۸	
۶٩	۴-۳- تحلیل رفتار مکانیکی نانوکامپوزیتهای لایهای فلز-گرافن	
۶٩	۳–۴–۳ مقدمه	
٧٠	۳-۴-۴ تابع پتانسیل و مدلسازی نمونه	
۷١	۳-۴-۳ نتایج شبیهسازی و تشریح آن	
۷۸	۴-۴-۳ نتیجه گیری	
٨١	تحلیل رفتار و خواص مکانیکی نانوکامپوزیت شیشههای فلزی تقویت شده	فصل چهارم:
٨١	۱–۴ مقدمه	
٨٢	۴-۲ تحلیل رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی-شیشهی فلزی	
٨٢	۲-۴–۱ مقدمه	
٨۴	۴-۲-۴ پتانسیلهای برهمکنش و نمونههای آزمایش ۲۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰	
٩٠	۴–۲–۳ شیشهی فلزی خالص ۵۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰	
۹١	۴-۲-۴ بارگذاری کششی	
٩٣	۴-۲-۴ بارگذاری کششی عرضی۴	
٩۵	۴-۲-۴ بارگذاری فشاری ۲-۴-۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰	
٩۶	۴–۲–۷ مکانیزمهای تغییر شکل	
٩٨	۴-۲-۴ نتیجه گیری	
٩٩	۴-۳ تحلیل رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت شیشهی فلزی-گرافن	
٩٩	۴–۳–۱ مقدمه	
۱۰۲	۴-۳-۴ پتانسیلهای برهمکنش و نمونههای آزمایش ۲۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰	
۱۰۵	۴–۳–۳ خواص فیزیکی و مکانیکی۴	
۱۰۷	۴–۳۴ نتایج نمونههای کوتاه	
۱۱۳	۴-۳-۵ نتایج نمونههای بلند	
۱۱۸	۴-۳-۶ نتیجه گیری	
171	نتايج	فصل پنجم:
171	۵-۱ نتیجهگیری	
170	۵-۲ پیشنهاد موضوع تحقیق	
177	مبانی فیزیکی روش شبیهسازی دینامیک مولکولی	پيوست الف:
۱۲۸	الف-۱ مبانی ترمودینامیکی	
۱۳۳	الف-۲ مبانی نظریه جنبشی	
14.	الف-۳ مبانی مکانیک آماری	
۱۵۱	پتانسیلهای برهم کنش	پيوست ب:
107	ب-۱ سیستمهای اتمی	
۱۵۳	ب-۲ سیستمهای مولکولی	
۱۵۹	ب-۳ پتانسیلهای چندجسمی	
181	نمونهای از کد برنامهنویسی در نرمافزار لمپس	پيوست ج:
187	ج-۱ مدل نانوکامپوزیت آلومینیم - نانولولهی نیترید بور	

185	ج-۲ تعادل ترموديناميكي نانوكامپوزيت	
188	ج-۳ بارگذاری مدل نانوکامپوزیت	
180		مراجع

فهرست شكلها

صفحه: ۴	شکل (۱-۱) مدل کرهی سخت سل واحد برای ساختار بلوری مکعب با وجوه مرکزدار.
ی نسبت به دما و (ب) نمودار	شکل (۱-۲) (الف) مقایسه شماتیک انتقال شیشه و تبلور براساس تغییر حجم/آنتالپی
٩	شکل گیری در مقایسه با نمودار تبلور.
شههای فلزی بالک، و شیشهی	شکل (۱–۳) مقایسه نرخ خنکسازی بحرانی و T_g/T_m برای شیشههای فلزی نواری، شی
١.	سيليكا.
١١	شكل (۱-۴) تابع توزيع جفت.
١٢	شکل (۱–۵) رفتار تغییر شکل شیشههای فلزی در سه مقیاس نانو، مسو، و ماکرو.
ش-کرنش به دست آمده برای	شکل (۱-۶) خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای مس-نانولولهی کربنی: (الف) نمودار تن
18	آزمایش فشار، و (ب) استحکام تسلیم و مدول یانگ با افزایش درصد حجمی نانولوله.
می نیترید بور تحت کشش در	شکل (۱–۷) نمودارهای تنش-کرنش آلومینیم خالص و کامپوزیت نوار آلومینیم-نانولول
١٧	دمای اتاق.
۲۵	شكل (۲-۱) تابع پتانسيل لنارد-جونز.
77	شکل (۲-۲) پیکربندی اولیه ذرّات برای یک سیستم سه بعدی.
۲۸	شکل (۲–۳) توزیع سرعت ذرّه در تعادل.
٢٩	شکل (۲–۴) توزیع سرعت ذرّه در تعادل.
ذره دیگر از سمت مخالف وارد	شکل (۲-۵) شرایط مرزی تناوبی. وقتی که ذرهای از جعبه شبیهسازی بیرون میرود یک
و همسایهی واقعی و مجازی به	جعبه شده و جایگزین آن می گردد. در محاسبه برهم کنش ذرّات در محدوه برش، هر در
٣١	حساب ميآيند.
(001) به ترتیب در راستای	شکل (۳-۱) پیکربندی اولیّهی نمونهی شبیهسازی با سطوح بلوری (100)، (010) و
48	محورهای x و z و x
ی آزمایش (الف) کشش و (ب)	شکل (۳-۲) تأثیر نرخ کرنش در مدول یانگ و نسبت پواسون نانوآلومینیم تک-بلور برا:
۴۸	فشار.
نشش و فشار. ۴۸	شکل (۳-۳) تأثیر نرخ کرنش در استحکام تسلیم نانوآلومینیم تک-بلور در آزمایشهای ک
(الف) کشش و (ب) فشار. ۵۱	شکل (۳-۴) تأثیر دما در مدول یانگ و نسبت پواسون نانوآلومینیم تک-بلور در آزمایش

شکل (۳–۵) تأثیر دما در استحکام تسلیم نانوآلومینیم تک-بلور برای بارگذاری کششی و فشاری.

۵١

شکل (۳–۱۳) مکانیزم تغییر شکل ماتریس خالص (سمت چپ) و نانوکامپوزیت نانلولهی نیترید بور بلند-آلومینیم (سمت راست) در بارگذاری کششی در کرنشهای (الف) ۱۸۲ $x = x^3$ ، (ب) $\pi/1 = x^3$ و (ج) $\pi/2 = x^3$ ، (د) مکانیزم شکست نانولوله درون ماتریس در کرنش محوری $\pi/1 = x^3$ و (ه) نمای بزرگ شدهی ترک تشکیل شده در ماتریس خالص در شکل (ج). در این شکل، عناصر آلومینیم، نیتروژن و بور به ترتیب با رنگهای سبز، آبی و زرد نمایش داده شدهاند. π شکل (ج). در این شکل، عناصر آلومینیم، نیتروژن و بور به ترتیب با رنگهای سبز، آبی و زرد نمایش داده شدهاند. π شکل (۳–۱۴) مکانیزم تغییر شکل ماتریس خالص (سمت چپ) و نانوکامپوزیت نانولولهی نیترید بور بلند-آلومینیم (سمت راست) شکل (۳–۱۴) مکانیزم تغییر شکل ماتریس خالص (سمت چپ) و نانوکامپوزیت نانولولهی نیترید بور بلند-آلومینیم (سمت نمک (سمت) در بارگذاری فشاری در کرنشهای (الف) $\pi/1 = x^3$ ، (ب) $\pi/1 = x^3$ و (م) مکانیزم تغییر شکل ماتریس خالص (سمت به و نانوکامپوزیت نانولولهی نیترید بور بلند-آلومینیم (سمت نمک (سمت) در بارگذاری فشاری در کرنشهای (الف) $\pi/1 = x^3$ ، (ب) $\pi/1 = x^3$ و (ج) $\pi/1 = x^3$. (ب) $\pi/1 = x^3$ و (م) مکانیزم تغییر شکل نانولولهی نیترید بور بلند-آلومینیم (سمت نمک (سمت) در بارگذاری فشاری در کرنشهای (الف) $\pi/1 = x^3$ ، (ب) $\pi/1 = x^3$ و (ج) $\pi/1 = x^3$. (د) مکانیزم شکست نانولولهی نیترید بور در درون ماتریس در کرنش محوری $\pi/1 = x^3$ و (ه) مکانیزم تغییر شکل نانولولهی نیترید بور تنها

کششی (الف) و فشاری (ب).

(بدون ماتریس) در کرنش محوری ۲/۰= £x. در این شکل، عناصر آلومینیم، نیتروژن و بور به ترتیب با رنگهای سبز، آبی و زرد نمایش داده شدهاند.

شکل (۳–۱۵) نمودار شماتیک نمونههای (الف) فلز خالص و (ب) نانوکامپوزیت لایهای فلز-گرافن، (ج) نمودارهای تنش-کرنش نمونهی نانولایهای مس-گرافن (*III*)، نمونهی مسی (*II2*) و لایهی فلزی منفرد (*II3*) تحت بارگذاری فشاری، و (د) فرایندهای بارگذاری فشاری و بارگذاری معکوس نمونهی کامپوزیت (*III*)؛ شکلهای الحاقی در نمودار (د) مکانیزم تغییر شکل متناظر با نقطهی *IP* را نشان میدهند.

شکل (۳–۱۶) ساختارهای اولیّه و تغییر شکل یافتهی (بر اساس CNA) (الف) نمونهی مس II2 در کرنش ۰/۰۸، (ب) لایهی فلزی منفرد II3، (ج) کامپوزیت نانولایهای مس-گرافن III در کرنشهای مختلف، (د) لایههای گرافن تغییر شکل یافته در کرنش ۲/۲ و (ه) ساختار نهایی نمونهی III با برگرداندن کرنشهای فشاری اعمال شدهی ۰/۱۵، ۱/۰، ۱/۵ و ۲۴

شکل (۳–۱۷) (الف) نمودارهای تنش-کرنش نمونههای نانولایهی گرافن-مس I تا V تحت بارگذاری فشاری و (ب) ساختار تغییر شکل یافتهی نمونههای نانولایهی گرافن-مس IV ، III ، V و V در کرنش ۰/۱ $\varepsilon_{\chi} = \epsilon_{\chi}$ براساس تحلیل CNA. ۷۷

شکل (۳–۱۸) مکانیزم تغییر شکل پلاستیک نمونهی نانوکامپوزیت III برای مواد مختلف ماتریس در کرنش فشاری ۱۰٪. ۷۸

شکل (۴-۱) (الف) نمودار شماتیک شیشههای فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی بلند و کوتاه، (ب-ه) به ترتیب پیکربندی اتمی شیشهی فلزی خالص، نانوکاموپوزیت تقویت شده با نانولولهی کربنی بلند و کوتاه، و نانولولهی کربنی زیگزاگ، و (و) تابع توزیع جفت نمونهی اصلی ۲۵۵وکتر عد از خنک سازی. شکل (۴-۲) (الف) نمودار تنش-کرنش و تشکیل باند برشی نمونه با ابعاد ^۳۸ ۸۰۲×۳۰۰×۲۰۰۰؛ رنگ بندی شکل الحاقی، کرنش برشی اتمی موضعی تغییر شکل پلاستیک ماده را مینمایاند. و (ب) نمودار تنش-کرنش نمونهی شیشهی فلزی خالص برای دو نسبت ابعاد مختلف. شکل (۴-۳) نمودار تنش-کرنش برای آزمایش کشش در راستای طولی برای (الف) نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی بلند-شیشهی فلزی، (ب) نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی کوتاه-شیشهی فلزی، و (ج) نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی بلند-

شیشهی فلزی برای دو کسر اتمی مختلف از نانولولهی بلند. نمادهای S و P به ترتیب نشان دهندهی شرایط مرزی آزاد و تناوبی میباشند. شکل (۴-۴) نمودارهای تنش-کرنش شیشههای فلزی خالص، نانوکامپوزیتهای نانولولهی کربنی بلند و کوتاه-شیشهی فلزی تحت کشش عرضی و (ب) تصاویر فصل مشترک نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی بلند-شیشهی فلزی در دو وضعیت بارگذاری مختلف.

شکل (۴–۵) نمودارهای تنش-کرنش شیشهی فلزی، نانوکامپوزیت شیشهی فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی بلند (الف) و کوتاه (ب) برای آزمایش فشار ساده.

شکل (۴-۶) مکانیزمهای تغییر شکل شیشههای فلزی (الف و د)، نانوکامپوزیتهای تقویت شده با نانولولهی کربنی بلند (ب و ه) و نانوکامپوزیتهای تقویت شده با نانولولهی کربنی کوتاه (ج و و). تصاویر ستون راست و چپ به ترتیب برای آزمایشهای کشش و فشار هستند. تصویر سمت راست هر قسمت، کرنش اتمی داخل نمونه با طیف رنگی را نشان میدهد. تصاویر الحاقی بزرگ شده، تغییر شکل پلاستیک را با جزئیات بیشتر نشان میدهند. در این شکلها اتمهای کربن، مس و زیرکونیم به ترتیب با رنگهای آبی، زرد و قرمز نشان داده شدهاند.

شکل (۴–۷) نمودار شماتیک نمونههای آزمایش شیشهی فلزی و نانوکامپوزیت شیشهی فلزی-گرافن تقویت شده با گرافنهای بلند و کوتاه. نماهای جلو و بالای هر نمونه نشان داده شدهاند.

شکل (۴–۸) مدول یانگ و نسبت پواسون تخمین زده شده در راستای محور ∑ (الف) برای نمونههای شیشهی فلزی و نانوکامپوزیتهای I تا X و (ب) به عنوان تابعی از کسر وزنی اتمهای کربن گرافن. نمادهای I(S) و I(L) نمونهی I به ترتیب در حالتهای کوتاه و بلند را نشان میدهند.

شکل (۴–۹) نمودارهای تنش-کرنش نمونههای I، II و III (الف)، مکانیزم تغییر شکل نمونهی I (ب)، نمونهی II (ج)، و نمونهی III (د) در کرنشهای اعمالی مختلف تحت بار کششی در راستای z.

شکل (۴–۱۰) نمودارهای تنش-کرنش نمونههای I، IV و V (الف)، مکانیزم تغییر شکل و شکست نمونهی IV (ب)، و نمونهی V با زاویهی دهانهی [°]45 = θ (ج) و [°]6.63 = θ (۵) در کرنشهای مختلف تحت بار کششی در راستای *z*. (د) تعریف زاویهی دهانه θ بین دو تقویت *گ*ر مجاور.

شکل (۴–۱۱) (الف) نمودار تنش-کرنش نمونههای I و VI و (ب) مکانیزم تغییر شکل نمونهی VI در کرنشهای مختلف تحت بار کششی در راستای z.

شکل (۴–۱۲) نمودارهای تنش-کرنش نمونههای I، VII و VII (الف)، مکانیزم تغییر شکل نمونهی *I* (ب)، نمونهی VII (ج) و نمونهی VIII در کرنشهای مختلف تحت بار کششی در راستای محور *z*.

شکل (۴–۱۳) منحنیهای تنش-کرنش نمونههای IX ،I و X (الف)، مکانیزم تغییر شکل نمونهی IX (ب) و نمونهی X (ج) در کرنشهای مختلف تحت بار کششی در راستای *z*.

فهرست جدولها

صفحه: ۴۷	جدول (۳–۱) خواص مکانیکی نانوآلومینیم تک-بلور در مقایسه با نتایج دیگران.
۴۹ .ر	جدول (۳-۲) تأثیر نرخ بارگذاری در کرنش تسلیم نانوآلومینیم تک-بلور برای بارگذاریهای کششی و فشاری
۵١	جدول (۳-۳) تأثیر دما در کرنش تسلیم نانوآلومینیم تک-بلور برای بارگذاریهای کششی و فشاری.
ی کسرهای	جدول (۳-۴) استحكام (GPa)، مدول الاستيك (GPa) و نسبت پواسون نانو كامپوزيت آلومينيم تقويت شده برا
87	اتمی مختلف نانولولهی نیترید بور بلند در بارگذاریهای کششی و فشاری.
ای قطرهای	جدول (۳–۵) استحكام (GPa)، مدول الاستيك (GPa) و نسبت پواسون نانوكامپوزيت آلومينيم تقويت شده بر
54	مختلف نانولولهی نیترید بور بلند در بارگذاریهای کششی و فشاری.
۷١	جدول (۳-۶) ضخامت پنج نمونهی فلزی و کامپوزیت لایهای (p) و همچنین ضخامت هر لایهی فلزی (q).
٧۶	جدول (۳–۷) مدول الاستیک فشاری و نسبت پواسون برای نمونههای مس خالص و کامپوزیت نانولایهای.
٩٠	جدول (۴-۱) خواص مکانیکی شیشهی فلزی برای دو نسبت ابعاد مختلف با شرایط مرزی تناوبی-آزاد-آزاد.
۱۱٪ اتمی)	جدول (۴–۲) خواص مکانیکی نانوکامپوزیت شیشهی فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی کوتاه و بلند (
٩٢	تحت بار کششی تک-محوری برای شرایط مرزی تناوبی-آزاد-آزاد.
کوتاه و بلند	جدول (۴–۳) خواص مکانیکی شیشهی فلزی و نانوکامپوزیت شیشهی فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی ً
٩۶	تحت بارگذاری فشاری ساده برای شرایط مرزی تناوبی-آزاد-آزاد.
^ہ ترتیب در	جدول (۴-۴) کسرهای اتمی و وزنی گرافن و چگالی کلّیّهی نمونهها. نمادهای (I(S) و I(L) نمونهی I به
1.8	حالتهای کوتاه و بلند را نشان میدهند.
١٠٩	جدول (۴–۵) چقرمگی (MJ/m ³) نمونههای کوتاه II تا VI و درصد افزایش آن نسبت به نمونهی خالص I.
118	جدول (۴-۶) چقرمگی (MJ/m³) نمونههای بلند VII تا X و درصد افزایش آن نسبت به نمونهی خالص I.

فصل اول

مقدمه و مروری بر مطالعات قبلی

۱–۱– مقدمه

فلزات حدود دو سوم از عناصر جدول تناوبی را تشکیل میدهند. تعریف سادهای برای فلزات وجود ندارد. با وجود این، هر عنصر شیمیایی که خواص فلزی داشته باشد، به عنوان یک فلز دستهبندی میشود. این خواص فلزی میتوانند جلایی، هدایت حرارتی و الکتریکی خوب، و قابلیت شکلپذیری یا تغییر شکل دائم در دمای اتاق باشند. آن عناصر شیمیایی که این خواص را ندارند، به عنوان نافلز طبقهبندی میشوند. عناصری مانند کربن، فسفر، سیلیسیم، و گوگرد که شبهفلز نامیده میشوند، گاهی مانند فلزات و گاهی مانند نافلزات رفتار میکنند.

فلزات به ندرت به صورت خالص به کار برده می شوند؛ بلکه عملاً در ترکیب با دیگر عناصر به عنوان مواد آلیاژی مورد استفاده قرار می گیرند. آلیاژ به عنوان مادهای دارای خواص فلزی تعریف می شود که از دو یا چند عنصر تشکیل شده باشد. عناصری که به عنوان مواد آلیاژی به کار برده میشوند، معمولاً فلزات یا شبهفلزات هستند. خواص یک آلیاژ از خواص فلزات و شبهفلزات خالص تشکیل دهنده متفاوت است و این اختلاف است که آلیاژها را سودمند میسازد. تولید کنندگان با ترکیب فلزات و شبهفلزات میتواند آلیاژی را با خواص مورد نیاز درست نمایند. اگرچه فلزات خیلی کم به صورت خالص استفاده میشوند، لیکن درک خواص آنها به عنوان مواد تشکیل دهنده آلیاژها ضروری میباشد. ویژگی کلیدی که فلزات را از غیر فلزات جدا مینماید، پیوند بین اتمها می باشد. مواد فلزی، الکترونهای آزاد دارند که میتوانند آزادانه از یک اتم به اتم دیگر حرکت نمایند. وجود این الکترونهای آزاد است که تأثیر که میتوانند آزادانه از یک اتم به اتم دیگر حرکت نمایند. وجود این الکترونهای آزاد است که تأثیر زیادی در خواص مواد فلزی دارد. به عنوان مثال، مواد فلزی تمایل دارند که هادیهای الکتریکی خوبی باشند، چون که الکترونهای آزاد میتوانند داخل فلز آزادانه حرکت نمایند. استحکام، سختی، چقرمگی، به صورت خواص فیزیکی، شیمیایی، الکتریکی و مکانیکی تعیین میگردند. استحکام، سختی، چقرمگی، الاستیسیته، پلاستیسیته، تردی^۱، نرمی^۲ و قابلیت چکشخواری جزو خواصی هستند که رفتار مکانیکی ماده را تحت بارگذاری اعمال شده نشان میدهند.

در حال حاضر، ما در حال گذر به دورهی جدیدی هستیم که در آن، بشر، ساخت ساختارها و تکنولوژیها در مقیاس اتمی و مولکولی را آغاز نموده است. این نانوتکنولوژی میتواند روش زندگی بشر را در دهههای آینده دگرگون سازد. اهمیّت مدلسازیهای محاسباتی، خصوصاً شبیهسازیهای اتمی و مولکولی، در توسعهی این تکنولوژیهای جدید در حال افزایش است. تأثیر اتمها و مولکولهای منفرد و خواص نانوساختاری میتواند رفتار مواد را در مقیاس نانو متأثّر سازد [۱]. محققان با استفاده از روشهای تجربی و تحلیلی نشان دادهاند که به دلیل تأثیر سطوح آزاد، ساختار و خواص نانومواد میتوانند از ساختار و خواص مواد در ابعاد ماکرو کاملاً متفاوت باشند [۲–۴]. در حقیقت کوچکسازی ابعاد مواد

¹ Brittleness

² Ductility

از مقیاس ماکرو و میکرو به مقیاس چندین نانومتر، تغییرات زیادی را ممکن است در خواص مکانیکی مواد ایجاد نماید. چنین مشاهداتی برای نانومواد زیادی در دهههای گذشته دیده شده است [۱].

مادهی کامپوزیت به عنوان مادهای که از دو فاز مختلف یا بیشتر تشکیل شده تعریف می شود. مواد کامپوزیت با ماتریس فلزی مزایای عملکردی زیادی نسبت به فلزات فراهم می نمایند. در واقع کامپوزیت با ماتریس فلزی به دلیل مدول الاستیک، استحکام و پایداری حرارتی بالا کاربردهای امیدبخشی در صنایع اتومبیل و هوافضا پیدا کردهاند. مواد کامپوزیتی که ابعاد حداقل یکی از اجزای تشکیل دهندهی آن از ۱۰۰ نانومتر (nm) کمتر باشد نانوکامپوزیت نامیده می شود. با اضافه نمودن درصد کمی از نانولوله ی کربنی، نانولولهی نیترید بور، یا گرافن بهبود قابل ملاحظهای در خواص مکانیکی کامپوزیتهای فلزی به دست آمده است [۵–۱۱]. اخیراً تأثیر اضافه نمودن این نانوساختارها در رفتار مکانیکی فلزات توجه روز افزونی را به خود جلب کرده است.

۲-۱– فلزات بلوری

یک مادهی بلوری، مادهای است که در آن، اتمها در آرایشی تکراری یا دورهای در محدودهی بزرگی قرار میگیرند. به عبارت دیگر، ترتیبی در مقیاس بزرگ وجود دارد به طوری که در فرآیند انجماد، اتمها خود را در یک الگوی تکراری سه بعدی مستقر میکنند که در آن هر اتم، توسط نزدیک ترین اتمهای مجاور احاطه میشود. همهی فلزات تحت شرایط عادی انجماد، ساختارهایی بلوری تشکیل میدهند. برای توصیف این ساختارهای بلوری ، اتمها به صورت کرههایی جامد با قطر معینی مدل سازی می شوند. از واژهی شبکه هم به جای ساختارهای بلوری استفاده میشود که از آرایش سه بعدی مکان اتمها تشکیل میشود. هر شبکه یا ساختار بلوری هم به واحدهای تکراری کوچکی به نام سلهای واحد قابل پیوند اتمی در مواد فلزی از نوع فلزی بوده و بنابراین ذاتاً غیرجهتی ^۱ است. از این رو، برای تعداد و موقعیّت اتمهای مجاور، محدودیّت کمتری وجود دارد؛ لذا، تعداد اتمهای مجاور نسبتاً بزرگ و انباشتگی اتمی متراکمی را برای اکثر ساختارهای بلوری فلزی فراهم مینماید. سه ساختار بلوری نسبتاً ساده برای اکثر فلزات رایج وجود دارند که عبارتند از: ساختار مکعبی با وجوه مرکزدار، ساختار مکعبی مرکزدار، و ساختار شش ضلعی فشرده [۱۲].

در ساختار بلوری مکعب با وجوه مرکزدار، سل واحدی به شکل مکعب وجود دارد که اتمها در رأسها و در مراکز وجوه آن قرار می گیرند. فلزاتی مانند مس، آلومینیم، نقره، نیکل، و طلا جزو این دسته از ساختارهای بلوری هستند. شکل (۱–۱) مدل کرهی سخت سل واحد در ساختار بلوری مکعب با وجوه مرکزدار را نشان می دهد که در آن کرهها یا هستههای یونی مجاور، همدیگر را در راستای قطر هر وجه مرکزدار را نشان می دهد که در آن کرهها یا هستههای یونی مجاور، همدیگر را در راستای قطر هر وجه مرکزدار را نشان می در $D = 2R\sqrt{2}$



شکل (۱–۱) مدل کرهی سخت سل واحد برای ساختار بلوری مکعب با وجوه مرکزدار [۱۲]. فلزات با ساختار بلوری مکعب با وجوه مرکزدار مانند آلومینیم و مس دارای اهمیّت و کاربرد وسیعی در صنعت و تکنولوژی پیشرفته دنیای امروز هستند. با گسترش تکنولوژی نوظهور نانو و کاهش ابعاد

¹ Nondirectional

تحلیل و بررسی مواد به سطح نانومتر، فلزات از جمله موادی هستند که در وسایل مقیاس نانو و در نانوکامپوزیتها مورد استفاده قرار می گیرند [۱۳]. بنابراین، مطالعه و تحلیل این دسته از مواد در ابعاد نانو جهت شناسایی و تعیین خواص مکانیکی آن یک ضرورت به نظر میرسد. تاکنون تلاشهای زیادی در این زمینه توسط محققان صورت گرفته است. برای انجام این کار، روشهای تجربی، تحلیلی و محاسباتی زیادی (مانند روشهای تحلیل مکانیک پیوسته، روش محاسباتی اجزاء محدود، روش شبیه-سازی دینامیک مولکولی، و غیرہ) توسعه دادہ شدہاند. به عنوان مثال، خان ٬ و همکارانش [۱۴] خواص مکانیکی نانوبلور آلومینیم تحت بارگذاری فشاری را مطالعه نمودند. نتایج آنها نشان میدهد که آلومینیم به نرخ کرنش حساس بود و با کاهش اندازهی دانه ، سختی و استحکام آن افزایش مییابد. گرو^۳ و همکارانش [۱۵] از روش چندمقیاسی برای مدلسازی و پیشبینی تغییر شکل آلومینیم تک-بلور تحت بارگذاری فشاری استفاده نمودند. یوان ً و همکارانش [۱۶] رفتار کششی نانو آلومینیم تک-بلور در دماهای مختلف را با استفاده از روش دینامیک مولکولی شبیهسازی نمودند. نتایج آنها نشان داد که تابع پتانسیل مورس می تواند رفتار الاستیک، پلاستیک و شکست مدل را پیش بینی نماید و با افزایش دما استحکام کششی آن کاهش یابد. گیو^۵ و همکارانش [۱۷] تأثیر اندازه و نرخ کرنش در رفتار مکانیکی فلز مس تک- بلور تحت بازگذاری برشی با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی را بررسی نمودند. آنها نشان دادند که تنش تسلیم با اندازهی نمونه کاهش می یابد و با نرخ کرنش افزایش ییدا می کند. کریمزاده⁶ و همکارانش [۱۸] آزمایش فروروندگی در مقیاس نانو^۷ را بر روی آلومینیم با استفاده از روش اجزاء محدود انجام دادند. آنها مدول یانگ و سختی را با انجام آزمایشات کششی و فروروندگی^ به دست آورند.

- ¹ Khan
- ² grain
- ³ Groh
- ⁴ Yuan
- ⁵ Guo
- ⁶ Karimzadeh
- ⁷ Nanoindentation
- ⁸ Indentation

۱–۳– شیشههای فلزی

شیشههای فلزی (یا فلزات شیشهای) مواد مهندسی نسبتاً نوظهوری هستند که از مذاب کردن آلپاژهای فلزی بلوری و خنکسازی با نرخ بالا به دست می آید؛ به طوری که در فرآیند خنکسازی از تشکیل مجدد ساختارهای بلوری جلوگیری به عمل آید. آلیاژ ذوب شده، فوق سرد شده و با گذر از دمای انتقال شیشه با ساختاری آمورف و غیربلوری منجمد می شود که به آن شیشههای فلزی گفته می شوند. ساختار اتمی این مواد مانند شیشهها آمورف بوده و به شدّت ترد هستند. آلیاژهای شیشههای فلزی ٔ توسط كلمنت٬ و همكارانش در سال ۱۹۶۰ [۱۹] توليد شد. آنها اولين نمونه طلا-سيليسيم را با ساختار غیربلوری به دست آوردند. ریخته گری مایعات فلزی با نرخ خنکسازی خیلی زیاد ۲۰^۹ Ks⁻¹ با استفاده از یک روش انجماد سریع امکان پذیر شد که با آن آلیاژهای شیشهای طلا-سیلیسیم و پلادیم-سیلیسیم ساخته شد. آلیاژهای شیشهای پلادیم-مس-سیلیسیم و پلادیم-نیکل-فسفر اولین شیشههای فلزی بودند که به شکل میلهای با قطر ۱ تا mm ۲ در سال ۱۹۷۴ تولید شدند [۲۰]. نمونههای درشت تر آن در سال ۱۹۸۲ ساخته شدند. با وجود این، این مواد توجه زیادی را در میان محققان به خود جلب نکرد تا این که در پایان دههی ۱۹۸۰ و آغاز دههی ۱۹۹۰ نتایج جدیدی به دست آمد. در آن زمان، شیشههای فلزی بالک^۳، به عنوان اجسام شیشهای سه بعدی که هر بعد آن از ۱ mm کمتر نباشد، تولید شد [۲۱، ۲۲]. امروزه شیشههای فلزی توجه زیادی از محققان را به خود جلب کردهاند و به یکی از مهمترین مواد در دو حوزهی شیشه و آلیاژهای فلزی تبدیل شدهاند. توان تشکیل شیشهی^۴ بالای برخی آلیاژها امکان ساخت شیشههای فلزی بالک تا اندازهی mm ۲۰۰ را با استفاده از فرایندهای مختلف ریخته گری و خنکسازی با آب را فراهم نموده است. جزئیات بیشتر در خصوص روشهای تولید و خواص جالب این دسته از مواد را می توان در فصل سوم از مرجع [۲۳] و یا مرجع [۲۴] یافت.

¹ Metallic glassy alloys

² Klement

³ Bulk metallic glasses (BMGs)

⁴ Glass-forming ability (GFA)

آلیاژ شیشههای فلزی دارای سه ویژگی مشتر ک زیر هستند [۲۵]: (۱) این آلیاژها جزو سیستمهای چند جزئی ^۱ هستند، (۲) عناصر تشکیل دهنده، نسبتهای اندازهی اتمی بالغ بر ۱/۱۲ را دارند، و (۳) اکثر عناصر آلیاژی آنها آنتالپی ترکیبی بزرگ و منفی با همدیگر دارند. به دلیل عدم وجود شبکهی بلوری و نابجایی ^۲ اتمها، مکانیزم تغییر شکل خاصی در آلیاژهای شیشهای بالک وجود دارد که در نتیجه، بلوری و نابجایی ^۲ اتمها، مکانیزم تغییر شکل خاصی در آلیاژهای شیشهای بالک وجود دارد که در نتیجه، استحکام بالا (حدود GPa ۲ برای شیشههای فلزی بر پایه مس، تیتانیم، و زیرکونیوم، حدود GPa ۳ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه نیکل، حدود GPa ۴ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۱ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۵ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۱ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa ۱ برای شیشههای فلزی بر پایه آهن، و حدود GPa از میا ۲ و اینو ۴ [۳۶] به شکل استوانه با قطر GPa از خواص مکانیکی آنها هستند [۳۳]. به عنوان مثال، آلیاژهای شیشهای آهن (یا کبالت) – کروم و مولیبدون – کربن – بور – تولیم تولید شده توسط آمیا ۳ و اینو ۴ [۳۶] به شکل استوانه با قطر Imm ۸۱، از خواص مکیل شیمه ای آوان تشکیل شیشه عالی و استوانه با قطر Imm ۸۱ می برشی مواعی، مکانیزم تغییر شکل برشی موضعی، مکانیزم تغییر شکل بالای میا ۲۰ مرد. ۲۰ مره می میاند و تا ۲۰، ۲۸].

شیشههای فلزی هر دو ویژگیهای شیشه و فلز را دارند که این موضوع در خواص بسیار جالب آن منعکس میشود. به عنوان مثال، استحکام آنها بسیار بالاتر از همتای بلوریشان میباشد، و هدایت حرارتی و الکتریکی آنها از مواد شیشهای معمولی خیلی بهتر هستند [۲۹، ۳۰]. برخلاف مکانیزم تغییر شکل در فلزات بلوری از طریق نابجایی، تغییر شکل پلاستیک در شیشههای فلزی به احتمال زیاد از طریق برهمکنش جمعی بازآرایش موضعی اتمی/مولکولی، یعنی از طریق نواحی انتقال برشی و باندهای برشی، صورت میگیرد [۲۴]. ساختار شیشهها در محدودهی کوتاه دارای نظم هستند؛ اما در محدودهی بزرگ بینظم هستند. محدودهی کوتاه به معنی یک ناحیهی موضعی در مقیاس نانو متشکل از اتم یا

³ Amiya

¹ Multicomponent systems

² Dislocation

⁴ Inoue

وقتی که شیشهی فلزی مذاب به دمای پایین تر از دمای ذوب T_m خنک می شود، اگر چه ساختار بلوری انرژی آزاد پایین تری دارد، لیکن به دلیل الزامات دیگر انرژی سطح، بلورسازی نمی تواند شکل بگیرد [۳۳]. فلز مذاب به یک حالت مایع به نام مایع فوق سرد تبدیل می شود. اگر نرخ کرنش به اندازه ی کافی زیاد باشد، به دلیل افزایش سریع لزجت، بازآرایش اتمی به سمت بلورسازی خیلی مشکل خواهد بود. سرانجام، مایع فوق سرد در دمای خاص دیگری به نام دمای انتقال g تبدیل به شیشه می شود. به مایع فوق سرد، به صورت ناحیه ای از دمای T_m تا دمای T_g مطابق شکل (۱–۲ الف) تعریف می شود. به دلیل این که حالت بلور انرژی آزاد و آنتالپی کمتری دارد، مایع فوق سرد در این ناحیه به تبلور تمایل بیشتری دارد. هسته سازی بلوری^۲ نقطه ی شروع تبلور می باشد. برای این که بلور واقعی مشاهده شود، این هسته ها لازم است که رشد یابند. این دو فرایند، متفاوت از همدیگر هستند. هسته سازی با رقابت بین انرژی آزاد و تنش سطحی کنترل می شود در حالی که رشد^۳ با لزجت ماده ی پیرامون. با ممانعت این هسته ها لازم است که رشد یابند. این دو فرایند، متفاوت از همدیگر هستند. هسته سازی با رقابت

¹ Supercooled

² Crystal nucleation

³ Growth



شکل (۱-۲) (الف) مقایسه شماتیک انتقال شیشه و تبلور براساس تغییر حجم/آنتالپی نسبت به دما و (ب) نمودار شکل گیری در مقایسه با نمودار تبلور [۲۴].

 $T = T_m$ همانطور که در شکل (۱–۲ ب) نشان داده شده است، زمان هستهسازی در دمای T_m و T_m ی سند. T_g واگرا می شود. بین T_m و T_g دمایی وجود دارد که در آن زمان هستهسازی به حداقل π_{min} می سد. این دما متناظر با ناحیهای است که در آن احتمال هستهسازی بیشتر است. برای تبدیل مایع شیشهی فلزی به شیشهی جامد، مطابق شکل (۱–۲ ب)، مسیر خنکسازی مناسبی لازم است تا از این ناحیه اجتناب شود. ترنبال ^۱ [۳۴] پیشبینی کرد که نرخ T_g به T_m را میتوان به عنوان معیاری برای شناخت ترکیب شیشهی فلزی با توان تشکیل شیشهی بالا استفاده کرد. شیشهی فلزی با $\frac{7}{7} < \frac{T_g}{T_m}$ ، $\pi_m t$ یا بزرگی دارد و تنها میتواند در محدودهی دمایی خیلی کوچکی متبلور شود. بر اساس این معیار، ترنبال و همکارانش [۳۵] توانستند شیشهی فلزی P-Ni را با نرخ خنکسازی K/s تولید کنند. شکل و همکارانش (۳۵] توانستند شیشهی فلزی برای آمادهسازی شیشههای فلزی نواری، شیشههای فلزی بالک، و شیشه-و شیلیکا را به طور شماتیک نشان میدهد.

¹ Turnbull



شکل (۱–۳) مقایسه نرخ خنکسازی بحرانی و T_g/T_m برای شیشههای فلزی نواری، شیشههای فلزی بالک، و شیشهی سیلیکا [۲۴].

شیشههای فلزی برخلاف مواد بلوری، سلهای ساختاری استانداردی مانند فلزات BCC ،FCC یا HCP ندارند. حتی با تکنیکهای مدرن تعیین ساختار بی شکل این چنین شیشههای فلزی هنوز غیر ممکن است [۲۴]. اگرچه شیشههای فلزی ساختارهای شبکهای یکسانی ندارند، لیکن یک سری پارامترهای ساختاری برای توصیف ساختارهای بی شکل آنها به کار می روند.

تابع توزیع جفت ((PDF)، احتمال یافتن اتمها به عنوان تابعی از فاصله r از اتم مرکزی را توصیف می کند که رایجترین روش استفاده شده برای تشخیص یک ساختار بی شکل می باشد. تابع توزیع جفت به صورت زیر تعریف می شود [۲۴]:

$$g_{ab}(r) = \frac{N}{4\pi r^2 \rho N_a N_b} \sum_{N_a}^{i=1} \sum_{N_b}^{j=1} \delta(r - |\vec{r}_{ij}|)$$
(Y-1)

که در آن $|\tilde{r}_{ij}|$ فاصلهی بین اتمهای i و j است. ρ چگالی سیستم، N_a و N_a و N_b به ترتیب تعداد اتمهای نوع a و d هستند. شکل (۱–۴) نمودار نوعی تابع توزیع جفت را نشان میدهد که از یک قلّه بلند در فاصلهای کم، قلّههای کوچک دنباله، و نوسانهای ریز حول مقدار یک تشکیل شده است. این نمودار به تدریج به عدد ۱ همگرا میشود که عدم وجود نظم یا همبستگی در محدودهی بلند را نشان میدهد.

¹ Pair distribution function (PDF)

ضریب ساختار ^۱ (*SF*)، عدد کوئوردیناسیون ^۲ (*CN*)، چندوجهی ورونی ^۳، و تحلیل همسایه مشترک^۴ (*CNA*) از دیگر پارامترهای توصیف کنندهی ساختار شیشههای فلزی هستند [۲۴، ۳۶، ۳۷]. برای تعیین چگونگی انباشتگی اتمی در شیشههای فلزی، یک سری از مدلهای ساختاری تعریف شدهاند. مدل DRPHS ، مدل انباشتگی چند چهار وجهی^۵، و مدل ECP مدلهایی تصویری هستند که برای این منظور به کار میروند [۲۴].



شكل (۱-۴) تابع توزيع جفت [۲۴].

اخیراً، شیشههای فلزی Cu-Zr توجه زیادی را به خود جلب کرده است، چون که نمونهی نوعی شیشههای فلزی خیلی مهمی از دوتاییهایی Cu-Hf ،Ni-Nb ،Ni-Zr گرفته تا چندتایی -Zr-Cu-Ni Al به حساب میآیند. از این رو، مطالعهی خواص ساختاری Cu-Zr در ترکیبهای مختلف میتواند فهم پایهای ساختار شیشههای فلزی دیگر را فراهم نماید [۲۴]. به دلیل ساختار دستهای، مکانیزم تغییر شکل شیشههای فلزی از فلزات بلوری کاملاً متفاوت است [۳۳]. برخلاف نابجاییهای انبوه در فلزات بلوری، تغییر شکلهای پلاستیکی در شیشههای فلزی، اثرات ساختاری روشنی را به جا نمیگذارد. عملکرد ماکروسکوپی شیشهی فلزی عموماً از طریق تجمع کرنشهای موضعی ناشی از واحدهای پلاستیکی کوچک میباشد. متناسب با دما و نرخ کرنش اعمال شده، توزیع و برهمکنش این واحدهای

¹ Structure factor

² Coordination number

³ Voronoi polyhedron

⁴ Common neighbor analysis

⁵ polytetrahedral packing model

پلاستیکی به دو مد تغییر شکل مختلف، همگن و غیرهمگن، منجر میشود [۳۲]. در دماهای پایین، نرمسازی برشی غیرهمگن، مکانیزم تصدیق شدهای برای تردی شیشههای فلزی میباشد. با شروع از یک ناحیهی بازآرایش اتمی موضعی در مقیاس نانو، نرمسازی برشی، کرنش پلاستیکی شدیداً موضعی را در یک باند برشی در مقیاس مسو ایجاد میکند و سرانجام، مطابق شکل (۱–۵)، منجر به شکست در مقیاس ماکرو می گردد [۲۴]. در دماهای بالا با نرخ کرنش پایین، موضع سازی برشی و برهمکنش ناپایدار این تغییر شکلهای پلاستیک توسط نوسانات حرارتی قوی ضعیف می گردد و ساختار بی شکل شیشههای فلزی منجر به جریان رئولوژیکی همگن در مقیاس نانو میشود.



(الف) مقياس نانو (ب) مقياس مسو

(ج) مقياس ماكرو

شکل (۱-۵) رفتار تغییر شکل شیشههای فلزی در سه مقیاس نانو، مسو، و ماکرو [۲۴].

در برخی از تحقیقات قبلی، از روش دینامیک مولکولی برای بررسی تحول ساختاری و پاسخ دینامیکی باندهای برشی استفاده شده است. به عنوان مثال، اگاتا^۱ و همکارانش تشکیل باندهای برشی در مدل سه بعدی شیشههای فلزی را گزارش کردند [۳۹]؛ و تشکیل باندهای برشی در تعدادی از شبیه سازی های دینامیک مولکولی مشاهده شده است [۴۰-۴۳]. در اکثر این شبیه سازی ها، باندهای برشی از طریق بررسی تغییر پیکربندهای اتمی مشخص می گردد که توسط جابجایی های غیر آفین^۲، کرنش برشی، و انرژی پتانسیل تعیین می گردند. شی^۳ و فالک^۴ [۴۱] بیان کردند در شیشههایی که با

- ¹ Ogata
- ² Non-affine
- ³ Shi
- ⁴ Falk

نرخ خنکسازی پایین تر تولید می شوند، باند برشی، آسان تر تشکیل می گردد. واکد و همکارانش [۴۴] دریافتند که چگالی باند برشی با افزایش نرخ کرنش افزایش مییابد. چن^۲ و همکارانش [۳۶] رابطهی بین ساختار اتمی و خواص مکانیکی را مطالعه کردند و اعلام کردند که تغییرات پلاستیکی و باندهای برشی، نتیجهی عدم تجانس^۳ ساختار اولیه می باشند. بعضی ساختارها، مانند بیست وجهی^۴، باز آرایشی سفت و سختی دارند [۴۰]. هرچه این ساختار بیشتر باشد، احتمال تشکیل باند برشی کمتر خواهد بود.

در آلیاژ شیشههای فلزی، بیشکل^۵ (آمورف) بودن ساختار آنها، به معنای همگنی نیست. از آنجا که ساختار یک شیشهی فلزی از مایع فوق سرد شده به دست میآید، نوسانات ذاتی مایع در آن وجود دارد. به عبارت دیگر، ساختار موضعی در سطح اتمی از مکانی به مکان دیگر تغییر میکند. لذا، عدم تجانس ساختاری، پاسخ مکانیکی شیشههای فلزی را مطمئناً تحت تأثیر قرار میدهد. در حقیقت، نایکنواختی خواص در مواد شیشهای از طریق تئوری هم پیش بینی شده است [۴۵، ۴۶]. تغییر شکل در شیشههای فلزی از طریق بازآرایش اتمی موضعی صورت میگیرد که ناحیهی تبدیل برشی^۶ نیز نامیده میشود. با اعمال تنش بزرگ، ناحیههای تبدیل برشی از محلهای مختلف سرچشمه گرفته و با همدیگر برهم کنش کرده و منجر به پخش باندهای برشی میگردند. باندهای برشی که کرنشهای پلاستیکی بزرگی را در نواحی نوار –مانند باریکی (حدود m ۱۰) متمرکز میکنند، به عنوان مود تغییر شکل غالب در شیشههای فلزی در دمای اتاق شناخته میشوند. کائو^۷ و همکارانش [۴۰] چگونگی تشکیل تغییر شکلهای برشی موضعی در شیشهی فلزی Tu-Th متمرکز میکنند، به عنوان مود تغییر دینامیک مولکولی توضیح دادند. در نمودار تنش –کرنش به دست آمده توسط آنها، در بخش اول تغییر

- ¹ Wakeda
- ² Cheng
- ³ Heterogeneity
- ⁴ Icosahedra
- ⁵ Amorphous
- ⁶ Shear transformation zone
- ⁷ Cao

شده و در کرنش ٪/۲ به طور ناگهانی و سریع کاهش پیدا نمود، که متناظر با محلیسازی برشی^۱ در یک باند برشی باریک است. سپس جریان پلاستیکی تقریباً منحصری در این باند اتفاق میافتد. برای مشاهدهی تغییر شکل ناهمگن شیشههای فلزی، از نرخ کرنش ثابت ¹⁻ ۲^{-۷} و دمای پایین ۵۰ K در شبیهسازیهای دینامیک مولکولی استفاده کردند. چن و همکارانش [۴۷] مکانیزم شکست شیشههای فلزی Zrs7Cu20Al10NisTis و Zrs7Cu20Al10NisTis را تحت گرادیان تنش با استفاده از آزمایش خمش مساقطهای بررسی نمودند و آن را با آزمایشهای معمولی فشاری و کششی مقایسه کردند. حسین^۲ و همکارانش [۴۸] رفتار و استحکام مکانیکی شیشههای فلزی را تحت بارگذاری کششی تک محوری با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. از تابع توزیع شعاعی برای پیشبینی غیربلوری بودن ساختار در طول فرایند خنکسازی ماده استفاده کردند. نتایج آنها نشان میدهد که با افزایش نرخ کرنش، استحکام تسلیم ولایی ماده استفاده کردند. نتایج آنها نشان میدهد که با افزایش نرخ کرنش، استحکام تسلیم ولایت ماده استفاده کردند. نتایج آنها نشان میدهد که با افزایش

۱-۴- نانوکامپوزیتهای فلزی

در سالهای اخیر، نانولولههای کربنی به دلیل خواص منحصر به فردشان توجه زیادی را در میان محققان جلب کردهاند و به دلیل خواص مکانیکی، فیزیکی و الکتریکی غیرعادیشان و همچنین ویژگیهای هندسی شامل قطر کوچک و نسبت ابعاد بالا، کاربردهای مهندسی گستردهای را پیدا کردهاند. ثابت شده است که اضافه نمودن درصد کمی از نانولوله کربنی به ماتریس، خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی مواد کامپوزیت را به طور قابل توجهای بهبود میبخشد [۵، ۶، ۴۹، ۵۰]. به عنوان مثال، ژائو^۳ و همکارانش [۴۹] کامپوزیت شیشهی فلزی Mg59.5Cu22.9Gd11Ag6.6 تقویت شده با نانولولهی کربنی را به روش ریخته گری تحت فشار تفاضلی^۴ در قالب مسی تولید نمودند. مزیت این روش این است که نانولولهها

¹ Shear localization

² Hussain

³ Zhao

⁴ Differential pressure casting

شکل لولهای خود را در ماتریس شیشهای در فرایند تولید حفظ میکنند، اگرچه دیده میشود واکنش-های بین نانولوله و عناصر ماتریس که منجر به شکلگیری فازهای بلوری میگردد. حضور نانولوله ی کربنی در ماتریس، استحکام کششی و کرنش شکست را بهبود بخشید که با ۳٪ حجمی نانولوله به ترتیب به مقادیر MPa ۱۰۰۷ و ۰۲/۲ درصد رسیدند. پال^۱ و شارما^۲ [۵۰] نانوکامپوزیت نقره تقویت شده با نانولولهی کربنی را به روش ترکیب مولکولی اصلاح شده تولید کردند. بررسی مولکولی نانوکامپوزیت نشان میدهد که نانولولههای کربنی به طور یکنواخت در ماتریش نقره پخش شدهاند.

سیلوستر ^۳ و همکارانش [۷] رفتار فشاری کامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانولولههای کربنی را با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی مطالعه کردند. آنها در یک حالت نیروی خارجی را تنها بر اتمهای ماتریس وارد نمودند که برای آن، ۵۰٪ افزایش در مدول یانگ دیده شد. در حالتی دیگر از بررسی خود، بارگذاری خارجی را بر اتمهای ماتریس و نانولوله اعمال کردند که برای آن ۲۰۰٪ بهبود مدول یانگ مشاهده گردید. لیکن، تغییری در تنش و کرنش تسلیم دیده نشد که به دلیل کمانش موضعی نانولوله تحت فشار اعمالی بوده است. عیسوی^۴ و همکارانش [۸] تأثیر مقدار نانولوله ی کربنی تا ۵٪ وزنی در خواص مکانیکی کامپوزیت با ماتریس آلومینیم را به روش تجربی بررسی نمودند. در نتایج آنها تا ۵۰٪ بهبود در استحکام تنشی و تا ۳۳٪ در سختی در مقایسه با آلومینیم خالص مشاهده شد. چا^۵ و همکارانش [۵۱] نانوکامپوزیت مس-نانولولهی کربنی با پخش یکنواخت تقویت گر را با یک روش تولید جدید به نام روش "ترکیب سطح مولکولی"⁶ تولید کردند. نتایج آنها نشان میدهد استحکام تولید جدید به نام روش "ترکیب سطح مولکولی"

¹ Pal

- ² Sharma
- ³ Silvestre
- ⁴ Esawi
- ⁵ Cha

⁶ Molecular-level mixing

کنندگی نانولولهی کربنی در میان مواد مختلف تقویت کننده بیشترین بوده است: هشت برابر ذرّات SiC و سه برابر ویسکرهای ⁽ SiC.



شکل (۱-۶) خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای مس-نانولولهی کربنی: (الف) نمودار تنش-کرنش به دست آمده برای آزمایش فشار، و (ب) استحکام تسلیم و مدول یانگ با افزایش درصد حجمی نانولوله [۵۱].

نانولولهی نیترید بور یک تقویت کنندهی جدید است که به دلیل ساختار بلوری مشابه با نانولولهی کربنی، دارای استحکام بالا، مرتجع و مدول یانگ بزرگ میباشد. استحکام کششی آن حدود GPa ۲۰ و مدول الاستیک آن حدود میتواند بار نانولولهی و مدول الاستیک آن حدود ۲۹۵ میباشد. است که پایداری حرارتی و شیمیایی آن از نانولولهی کربنی بهتر است [۵۲]. وی^۲ و همکارانش [۵۳] اعلام کردند که نانولولهی نیترید بور میتواند بار کششی خارجی حدود پنج برابر (۴۵۰۰ میانولولهی کربنی (۱۰۰۰ میباشد که پایداری حرارتی و شیمیایی آن از نانولولهی کربنی بهتر است (۵۲]. وی^۲ و همکارانش [۵۳] اعلام کردند که نانولولهی نیترید بور میتواند بار کششی خارجی حدود پنج برابر (۴۵۰۰ میانولولهی کربنی (۱۰۰۰ میتواند کاراتر باشد. این

ترایودی^۳ و همکارانش [۱۱] نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولولههای نیترید بور را با استفاده از مکانیک پیوسته و روش اجزاء محدود مدلسازی و شبیهسازی نمودند. نتایج آنها افزایش ۲۰ تا ۵۵ درصدی مدول یانگ نانوکامپوزیت برای مواد مختلف ماتریس تقویت شده با ۵ درصد حجمی نانولوله را نشان میدهد. یاماچی^۴ و همکارانش [۵۴] کامپوزیت نوار آلومینیم تقویت شده با نانولولههای چند

¹ Whiskers

² Wei

³ Trivedi

⁴ Yamaguchi

جدارهی نیترید بور تا درصد وزنی ۳٪ را برای اولین بار تولید کردند. نتایج آنها، تأثیر زیاد حضور نانولوله در تقویت خواص مکانیکی ماتریس را نشان میدهد (شکل ۱–۷). مدول یانگ از GPa ۱۵ برای نوار آلومینیم خالص به GPa ۳۵ افزایش یافت.



شکل (۱-۷) نمودارهای تنش-کرنش آلومینیم خالص و کامپوزیت نوار آلومینیم-نانولولهی نیترید بور تحت کشش در دمای اتاق [۵۴].

گرافن از لایهای دو بعدی به ضخامت یک اتم و از اتمهای کربن متصل به هم با ساختار لانه زنبوری تشکیل شده است. گرافن دارای خواصی منحصر به فرد میباشد که دارای کاربردهای زیادی در آینده خواهد بود. گرافن قوی ترین و سخت ترین مادهای است که تاکنون شناخته شده است؛ بلوری با بیشترین قابلیت کشش و با بیشترین هدایت حرارتی است [۵۵–۵۷]. مزیت اصلی استفاده از گرافن نسبت به نانولوله، سطح تماس بزرگ آن میباشد و این که در ترکیب با ماتریس، احتمال پیچش آن کمتر بوده و باعث میشود در ماتریس آسان تر پخش گردد [۵۸، ۵۹]. استحکام کششی گرافن حدود GPa و ۱۳ مدول یانگ حدود ماتریس آسان تر پخش گردد [۸۵، ۵۹]. استحکام کششی گرافن حدود دو با برای کامپوزیتهای فلزی جهت استفاده در کاربردهای ساختاری و کارکردی مینماید. در سالهای اخیر برای کامپوزیتهای فلزی جهت استفاده در کاربردهای ساختاری و کارکردی مینماید. در سالهای اخیر تلاشهای قابل توجهی برای تحلیل و تولید نانوکامپوزیتهای فلزی تقویت شده با گرافن صورت گرفته است [۹، ۱۰، ۲۱–۶۶]. وانگ و همکارانش [۲۹] کامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانوورقهای گرافن را برای اولین بار تولید کردند. در این تحقیق، استحکام کششی ۲۴۹ MPa برای کامپوزیت آلومینیم تقویت شده با ۲/۰ درصد وزنی نانوورق گرافن به دست آمد که به اندازهی ۶۲٪ بهبود استحکام را نسبت به آلومینیم تقویت نشده نشان میدهد. کرنش شکست نانوکامپوزیت تقویت شده با گرافن ۱۳٪ اعلام شده است که دو برابر از کرنش شکست ماتریس آلومینیم خالص (۲۷٪) کمتر بوده است که البته از ۵٪ کرنش استاندارد مورد نیاز برای کاربردهای مهندسی بیشتر میباشد. در تحقیق انجام شده توسط هوانگ ^۱ و همکارانش [۹] ، نمونههای نانوکامپوزیت مس تقویت شده با ۵/۲ درصد حجمی ورقهای اکسید گرافن کاهش یافته، ۸۰٪ افزایش در استحکام تسلیم (از ۱۶۰ به ۲۸۹ A) و ۳۰٪ افزایش در استحکام کششی نهایی (از ۲۵۵ تا MPa) در مقایسه با مس خالص از خود نشان دادند.

1-۵- اهداف رساله

فلزات به دلیل خواص مکانیکی و فیزیکی خاصی که دارند در صنعت ساختمان، اتومبیل، هوافضا، تولید و انتقال انرژی و غیره مورد استفاده زیادی قرار می گیرند. با وجود این، تلاشهای زیادی توسط محققان جهت بهبود خواص مکانیکی آنها صورت گرفته است. توسعهی نانومواد در سالهای اخیر، فرصت بهبود بیشتر خواص مکانیکی فلزات بلوری و غیربلوری (شیشهای) را فراهم نموده است. نانولولههای کربنی، نانولولههای نیترید بور، و گرافن به دلیل خواص مکانیکی عالی که دارند، توجه زیادی را جهت تقویت نمودن و بهبود خواص نانوکامپوزیتهای فلزی جلب نمودهاند. از آنجا که تولید و آنالیز نانوکامپوزیتها در سطح نانو تحلیلی مشکل و پرهزینه میباشد، لذا بررسی این دسته از مواد از طریق مدلسازیهای محاسباتی و شبیهسازی دارای اهمیّت ویژهای میباشد. روش دینامیک مولکولی روشی مطمئن و دقیق در شبیهسازی مواد در سطح اتمی و مولکولی به حساب میآید که تاکنون مورد استفاده محققان زیادی قرار گرفته است. بنابراین، در این تحقیق، رفتار و خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای فلزی تقویت شده شبیهسازی دینامیک مولکولی مدلهای مختلف نانوکامپوزیت با ماتریس فلزی ساخته شده و تأثیر حضور نانولولهی کربنی، نانولولهی نیترید بور، و گرافن در خواص و رفتار مکانیکی آنها مورد تجزیه و تحلیل قرار میگیرد. ماتریس در نظر گرفته شده در این تحقیق از نظر ساختار اتمی به دو دسته کلی فلزات بلوری و شیشههای فلزی (فلزات غیربلوری) تقسیم میشود. در دسته اول، فلز دارای ساختار منظم بلوری بوده و نوع ساختار بلوری مکعب با وجوه مرکزدار شامل فلزات آلومینیم، نقره، مس، طلا، و نیکل مورد بررسی قرار میگیرد. در دستهی دوم که ماده دارای ساختاری غیربلوری و بیشکل بوده و به شیشههای فلزی مشهور است، آلیاژ مس-زیرکونیوم به عنوان ماتریس نمونههای نانوکامپوزیت در نظر گرفته میشود.

در دستهی اول از نانوکامپوزیتها که ماتریس آن از فلز بلوری تشکیل می شود، تحقیق مورد بررسی به دو بخش مجزا تقسیم می گردد. در بخش اول، تأثیر نانولولهی نیترید بور بر رفتار و خواص مکانیکی فلز بلوری آلومینیم بررسی می گردد. در بخش دوم، خواص مکانیکی نانوکامپوزیت لایهای فلز – گرافن که از لایههای یک در میان فلز و ورق گرافن تشکیل می شود، مورد تجزیه و تحلیل قرار می گیرد.

در دستهی دوم از نانوکامپوزیتها که مادهی پایهی آن شیشهی فلزی میباشد، مطالعهی تحت بررسی به دو بخش متفاوت قابل تقسیم است. در بخش نخست، تأثیر نانولولهی کربنی در خواص و رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت بررسی می گردد. در بخش دوم، تأثیر ترکیب گرافن با ماتریس شیشهای بر روی خواص و رفتار تغییر شکل الاستیک و پلاستیک کامپوزیت مورد تجزیه و تحلیل قرار می گیرد.

در خصوص تأثیر اندازه که یکی از بحثهای مطرح در نانومواد و نانوکامپوزیتها میباشد به طور خاص در این رساله بررسی نمی گردد و جزو اهداف تعریف شده در پروپزال پژوهش حاضر نمیباشد.

در ادامهی مطلب، در فصل بعد، اصول و مفاهیم اساسی در روش شبیه سازی دینامیک مولکولی توضیح داده می شود. در فصل سوم، مدل سازی دسته ی اول نانو کامپوزیت ها آورده می شود و نتایج به دست آمده از شبیه سازی ها مورد بررسی قرار می گیرد. در فصل چهارم، به مدل سازی و شبیه سازی
دستهی دوم از نانوکامپوزیتها و تجزیه و تحلیل نتایج به دست آمده از آزمایشهای مکانیکی پرداخته میشود. در پایان هم در فصل پنجم، جمعبندی موضوع و نتایج به دست آمده مطرح خواهد شد.

فصل دوم

مبانی روش شبیهسازی دینامیک مولکولی

در این فصل، به طور مختصر به مبانی روش شبیهسازی دینامیک مولکولی پرداخته میشود. البته، به دلیل حجیم بودن موضوع، تمامی اصول و مبانی این روش در اینجا نمی گنجد. برای جزئیات بیشتر و توضیح کامل تر، می توان به کتاب های زیادی که در این زمینه منتشر شدهاند [۶۷، ۷۳، ۸۵، ۸۲، ۱۹۴] مراجعه کرد.

۲-۱- مقدمه

در عصر جدید فناوری نانو، برای تولید مواد جدید سودمند و بررسی پدیدههای فیزیکی در سطح مولکول، روشهای تجزیه و تحلیل میکروسکوپی ضروری میباشند. این روشها با اجزای سازندهی یک سیستم مانند مولکولها و ذرّات ریز سروکار دارند. کمّیّتهای ماکروسکوپی و میکروسکوپی مورد علاقه از تجزیه و تحلیل رفتار این اجزاء به دست میآیند. از جمله این روشها، یعنی "روشهای شبیهسازی مولکولی"، عبارت از روشهای مونت کارلو (MC)^۱ و دینامیک مولکولی (MD)^۲ میباشند [۶۷]. روشهای مونت کارلو توانایی زیادی در تجزیه و تحلیل تعادل ترمودینامیکی دارند، اما برای بررسی پدیدههای دینامیکی مناسب نیستند. روشهای دینامیک مولکولی برای تعادل ترمودینامیکی سودمند هستند، اما برای بررسی خواص دینامیکی یک سیستم که در تعادل نیست، بهتر میباشند.

دینامیک مولکولی روشی برای شبیهسازی رفتار ترمودینامیکی مواد در سه فاز جامد، مایع و گاز با استفاده از نیرو، سرعت و مکان ذرّات میباشد. در بین این عوامل، مهم ترین عامل، نیرو است. در شیبه-سازی دینامیک مولکولی کلاسیک، نیرو از پتانسیل کلاسیک به دست میآید. پتانسیل کلاسیکی، تابعی از مکان اتمها یا هستهها است و به موقعیت الکترونها در اتمها وابسته نیست. در شبیهسازی دینامیک مولکولی کوانتمی، نیرو از پتانسیل کلاسیکی و معادله الکترونی شرودینگر محاسبه میشود.

هدف اصلی در شبیه سازی دینامیک مولکولی، محاسبه ی رفتار ماکروسکوپی سیستم به کمک یک مدل میکروسکوپی است. مدلی که شامل برهم کنش مکانیکی بین مولکول ها باشد. مکانیک آماری ابزار نظری مناسبی برای انجام شبیه سازی دینامیک مولکولی فراهم میآورد. عناصر در گیر در یک مطالعه ی دینامیک مولکولی، روش فرمول بندی مسئله ی مورد نظر و چگونگی ارتباط با دنیای واقعی، از عواملی هستند که در دسته بندی مسائل دینامیک مولکولی مورد استفاده قرار می گیرند. مثال هایی از این دسته-بندی عبار تند از این که آیا برهم کنش ها کوتاه برد هستند یا بلند برد؟ آیا سیستم از لحاظ گرمایی یا مکانیکی منزوی است یا تحت تأثیر محیط خارج قرار دارد؟ آیا اجزای تشکیل دهنده سیستم، اتم های ساده بدون ساختار هستند و یا مولکول های پیچیده؟ آیا فقط برهم کنش های جفتی ذرّات در نظر گرفته میشود یا سهم چند ذرّهای نیز لحاظ می شود؟ و غیره.

۲-۲- پتانسیلهای برهمکنش

¹ Monte Carlo

² Molecular Dynamics

مهمترین عامل در مدلسازی دینامیک مولکولی یک ماده، تابع پتانسیل میباشد که نوع و شدّت برهم-کنش بین ذرّات ماده را تعیین می کند. برای مواد مختلف، توابع پتانسیل گوناگونی توسط محققان تاکنون معرفی شدهاند که در پیوست ب به طور مختصر توضیح داده شدهاند. با گرفتن مشتق از تابع پتانسل نسبت به مکان ذرّه، نیروی وارد شده به آن از طرف دیگر ذرّات به دست میآید. در پژوهش حاضر، برای مدلسازی مواد تحت بررسی، سه نوع تابع پتانسیل متفاوت مورد نیاز است. در نوع اول، برای توصیف برهمکنش بین ذرّات مواد فلزی از تابع پتانسیل متفاوت مورد نیاز است. در نوع اول، میشود که پتانسیلی چندجسمی میباشد (به بخش ب-۳ از پیوست ب مراجعه شود). در نوع دوم، برای تعریف برهمکنش بین اتمهای کربن در نانولولههای کربن و گرافن و همچنین بین اتمهای نیتروژن و بور در نانولولههای نیترید بور از تابع پتانسیل تواده میگردد. در نوع سوم، برای بیان برهمکنش بور در نانولولههای نیترید بور از تابع پتانسیل تواده میگردد. در نوع سوم، برای بیان برهمکنش فصل مشترک بین ذرّات ماتریس فلزی و ذرّات تقویت گرها در نانوکامپوریتها، تابع پتانسیل لنارد-جونز

الف- تابع پتانسيل EAM

پتانسیل EAM (روش اتم محاط شده^۱) که توسط داو^۲ و باسک^۳ [۶۹، ۶۹] معرفی شد، یک تابع پتانسیل چند-جسمی میباشد که در رسالهی حاضر برای توصیف برهم کنش بین ذرّات فلزی ماتریس به کار گرفته میشود. انرژی پتانسیل EAM از جمع جفت گونهی برهم کنش بین اتمها و جمع توابع محاطی^۴ اتمها تشکیل میشود:

$$U_{\text{total}} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N} \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^{N} F(\rho_i)$$
(1-7)

¹ Embedded atom method (EAM)

 $^{^{2}}$ Daw

³ Baskes

⁴ Embedding functions

$$\rho_i = \sum_{i=1}^N \psi(r_{ij}) \tag{(Y-Y)}$$

که در آن، زیرنویسهای i و i جفت اتم برهم کنش کننده از N اتم سیستم، r_{ij} فاصلهی بین آنها و $\varphi(r_{ij})$ انرژی بین اتمی جفت گونه هستند. $F(\rho_i)$ تابع پتانسیل محاطی برای اتم i را نشان میدهد که به چگالی الکترونی کل ρ_i احساس شده توسط آن اتم بستگی دارد.

ب- تابع پتانسیل ترساف

برای توصیف برهم کنشهای اتمی نانولولههای کربن و گرافن و همچنین بین عناصر نیتروژن و بور در نانولولههای نیترید بور از تابع پتانسیل ترساف ⁽ (که توسط ترساف [۲۰، ۱۴۱] معرفی شده است) استفاده می گردد. این تابع پتانسیل به صورت زیر تعریف می شود [۲۱]:

$$E = \sum_{i} E_{i} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi(r_{ij})$$
 (Y-Y)

$$\varphi(r_{ij}) = \sum_{i} \sum_{j>1} f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})]$$
(f-T)

که در آن، f_R ، f_c و f_A به ترتیب تابع برش و پتانسیلهای جفتی دافعه و جاذبه هستند. r_{ij} و h_i به f_R ، f_c به ترتیب فاصله از اتم i تا اتم j و تابع ترتیب پیوند^۲ هستند. این پارامترها به صورت زیر تعریف می شوند:

$$f_R(r_{ij}) = A \exp(-\lambda_1 r_{ij}) \tag{(\Delta-Y)}$$

$$f_A(r_{ij}) = -B \exp(-\lambda_2 r_{ij}) \tag{9-1}$$

$$b_{ij} = \left(1 + \beta^n \zeta_{ij}^n\right)^{-\frac{1}{2n}} \tag{Y-Y}$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \tag{A-Y}$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{\left[d^2 + (h - \cos\theta_{ijk})^2\right]}$$
(9-7)

¹ Tersoff potential

² Bond order function

که در آن، θ_{ijk} زاویهی پیوند بین پیوندهای ij و ij است. پارامترهای موجود در این توابع، پارامترهای پتانسیل ترساف نامیده میشوند که میتوان آنها را برای عناصر مختلف در مقالات منتشر شده توسط سایر محققین پیدا نمود.

ج- تابع پتانسیل لنارد-جونز

متداول ترین و ساده ترین پتانسیلی که در شبیه سازی کامپیو تری مورد استفاده قرار می گیرد، پتانسیل ۲-۱۲-۶ لنارد-جونز می باشد که به صورت زیر تعریف می شود [۷۳]:

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right]$$
 (1.-7)

که در آن، r فاصله بین دو اتم برهم کنش کننده است. σ فاصلهای است که در آن مقدار پتانسیل برابر صفر است. ع نیز مقدار حداقل پتانسیل میباشد (شکل ۲–۱).



شكل (۲-۱) تابع پتانسيل لنارد-جونز.

شکل (۲–۱) نمودار نوعی این نوع تابع پتانسیل را نشان میدهد. این تابع پتانسیل در فاصلههای اندک دارای دافعه بسیار قوی میباشد، در $\sigma = r$ از صفر گذشته و در ادامه با شیب بیشتری به مقدار حداقل \mathcal{F} – کاهش مییابد. در این نقطه، یعنی $\sigma^{21/6} = r_m$ نیروی بین دو ذره برابر صفر است. در ناحیه بعد از نقطه حداقل، نیروی بین ذرّات از نوع جاذبه بوده و به تدریج با دور شدن دو ذره از یکدیگر به صفر میل می کند. پتانسیل لنارد-جونز ۲۲-۶ امروزه به عنوان مدل بسیار مهمی برای بررسی رفتار به صفر میل در سیستمهای مختلف نظیر جامدات، مایعات، گازها، بررسیهای مختلف سطح، خوشههای مولکولی و سیستمهای دوبعدی مورد استفاده قرار می گیرد [۷۳]. در پژوهش حاضر از این پتانسیل برای

مدلسازی برهم کنش غبرپیوندی بین ذرّات تقویت گرها (نانولولهی کربن، نانولولهی نیترید بور و گرافن) و ماتریس استفاده می شود.

۲-۳- موقعیّتهای اولیّه

تعیین یک پیکربندی اولیّه از ذراّت برای روشهای دینامیک مولکولی فرآیندی اجتنابناپذیر است. اگر چه تعیین تصادفی موقعیّت اولیّهی ذراّت در یک ناحیهی شبیهسازی امکانپذیر است، اما یک پیکربندی منظم، همچون یک شبکهی مکعبی ساده یا یک شبکهی مکعبی با وجوه مرکزدار، به طریق سرراست تری قابل اجراست. تخصیص تصادفی موقعیّت ذرّات مشکل همپوشی نامطلوب ذرّات و دشواریهای ممکن در تحصیل کسرهای انباشتگی بالا را دارد. تخصیصهای شبکهای تقریباً از مسئلهی همپوشی آزاد است و می توان کسرهای انباشتگی بالا را دارد. تخصیصهای شبکهای تقریباً از مسئلهی همپوشی آزاد است نشان می دهد. شکل (۲–۲ الف) مدل یک شبکهی مکعبی ساده است که اساساً برای پیکربندی اولیّهی سیستمهای گازی یا مایع مناسب است. چون که در هر سل واحد تنها یک ذرّه وجود دارد، تعداد ذرّات موجود در یک سیستم که از تکرار سل واحد به اندازهی (1 – *Q*) مرتبه در هر جهت تشکیل می شود، برابر با Q = N است. در این حالت، مقدار ممکن *N* از میان مقادیر ۱، ۸، ۲۷، ۶۴، ۱۵۵، ۲۱۶، ۳۱۴۳.

ناحیهی شبیهسازی، یک مکعب به طول ضلع Qa = Qa است. که در آن، a، ثابت شبکه است. چگالی تعداد n و کسر حجمی $\phi_V = 4\pi (d/2)^3 N/3L^3$ و N/L^3 و $\phi_V = 4\pi (d/2)^3 N/3L^3$ و m مستند. مدل شبکهی مکعبی با وجوه مرکزدار نشان داده شده در شکل (۲-۲ ب) یکی از شبکههای متراکم است، و شبکهی مکعبی با وجوه مرکزدار نشان داده شده در شکل (۲-۲ ب) یکی از شبکههای متراکم است، و بنابراین به عنوان یک پیکربندی اولیّه از حالت جامد قابل اعمال است. چون که در سل واحد، چهار ذرّه وجود دارد، تعداد کل ذرّات در ناحیهی شبیهسازی با تکرار سل واحد به اندازهی (1 – Q) مرتبه در هر مراجه در هر بنابراین به عنوان یک پیکربندی اولیّه از حالت جامد قابل اعمال است. چون که در سل واحد، چهار ذرّه وجود دارد، تعداد کل ذرّات در ناحیهی شبیهسازی با تکرار سل واحد به اندازهی (1 – Q) مرتبه در هر جهت برابر با Q = Q است. در این حالت، تعداد کل ذرّات از میان مقادیر ۴، ۳۲، ۸۰۱، ۲۵۶، ۰۰۰ می جهت برابر با Q = Q است. در این حالت، تعداد کل ذرّات از میان مقادیر ۴، ۳۲، ۸۰۱، ۲۵۶، ۰۰۰ مرد مرد N/2 و از این قبیل انتخاب می شود. چگالی تعداد و کسر حجمی به ترتیب برابر با q = Q هستند. مانند سیستم دو بعدی، برای تعیین کمّیّتهای فوقالذکر، ابتدا و Q = Q

تعداد ذرّات N و کسر حجمی ϕ_V انتخاب می شوند، آنگاه Q و L محاسبه شده، و سرانجام فاصله ی شبکه a تعیین می گردد [۶۷].

برای سیستم گازی یا مایع، مدلهای سادهی شبکه نشان داده شده در شکل (۲-۲) برای ایجاد یک برنامهی شبیهسازی به طریقی سرراست قابل اعمال است. در مقابل، در مورد سیستم جامد، انتخاب یک شبکه مناسب برای پیکربندی اولیّهی ذرّات معمولاً با استفاده از خواص فیزیکی معلوم جامد انجام می گیرد.



(ب) شبکه مکعبی با وجوه مرکزدار

(الف) شبکه مکعبی ساده

شکل (۲-۲) پیکربندی اولیّه ذرّات برای یک سیستم سه بعدی [۶۷].

۲-۴- سرعتهای اولیّه

در روش دینامیک مولکولی، حرکت ذرّات به واسطهی تعقیب موقعیت و سرعت آنها در طول زمان توصیف میشود، بنابراین این عوامل باید به عنوان شرایط اولیّه تعیین گردند. اگر سیستم مورد نظر در تعادل ترمودینامیکی با دمای T باشد، سرعت ذرّات توسط تابع توزیع ماکسول به صورت زیر بیان میشود [۶۷]:

$$f(\mathbf{v}_i) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\{-\frac{m}{2kT}\left(v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2\right)\}$$
(1)-7)

که در آن، k ثابت بولتزمن، m جرم ذرّات، و $v_i = (v_{ix}, v_{iy}, v_{iz})$ بردار سرعت ذرّهی i است. چون که $v_i = (v_{ix}, v_{iy}, v_{iz})$ توزیع ماکسول f، تابع توزیع چگالی احتمال است، احتمال این که ذرّهی i در محدودهی خیلی کوچک

سرعت بین v_i و v_i ایشد، برابر با $f(v_i)dv_i$ است. مشخصات این تابع را میتوان به طریق سرعت بین ای به ای به ای به ای به منوان مؤلفه می ای به منوات. شکل (۲–۳) به وضوح نشان می دهد که دمای بالاتر در سیستم، احتمال ذرّاتی که با مؤلفه سرعت v_{ix} بزرگتری ظاهر شوند را افزایش می دهد.



شکل (۲–۳) توزیع سرعت ذرّه در تعادل [۶۷].

اگر به جای مؤلفههای سرعت، به اندازهی سرعت ذرّات توجه کنیم، توضیح روشن تری از آن $v_i = v_i$ مشخصات مقدور خواهد بود. تابع توزیع چگالی احتمال $\chi(v_i)$ برای سرعت $v_i = v_i$ مشخصات مقدور خواهد بود. تابع توزیع معادلهی (احتمال $\chi(v_i)$ به صورت زیر به دست آورد $(v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2)^{1/2}$

$$\chi(v_i) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v_i^2 \exp\left(-\frac{m}{2kT}v_i^2\right)$$
(17-7)

این معادله، نخست، با انتقال از مختصات متعامد به کروی، یعنی از (v_{ix}, v_{iy}, v_{iz}) به $(v_{ix}, v_{iy}, v_{iz}) = (v_i \sin\theta \cos\phi, v_i \sin\theta \sin\phi, v_i \cos\theta)$ و سپس، با وسیلهی رابطهی $(v_{ix}, v_{iy}, v_{iz}) = (v_i \sin\theta \cos\phi, v_i \sin\theta \sin\phi, v_i \cos\theta)$ و سپس، با استفاده از انتگرال نسبت به θ و ϕ در معادلهی نرمال سازی توزیع ماکسول حاصل می شود. انتگرالده در معادلهی نرمال سازی بعد از این انتگرال، تابع توزیع (v_i) است. شکل (۲-۴)، توزیع χ به عنوان تابعی از سرعت ذرّه v_i برای چند دمای سیستم را نشان می دهد. براساس شکل (۲-۴)، نمودار χ دارای نقطهای با مقدار اوج میباشد که با افزایش مقدار دما به سمت راست حرکت میکند. به عبارت دیگر، درصد ذرّاتی که دارای سرعت بزرگتری هستند، با دما افزایش پیدا میکند. سرعت ذرّه v_{mp} که مقدار اوج زویع است را میتوان از معادلهی (۲–۱۲) به صورت $(2kT/m)^{1/2}$ به دست آورد، که توزیع است را میتوان از معادلهی (۲–۱۲) به صورت $v_{mp}^{1/2}$ در یک سیستم، ذرّات بیشتری دارای "محتمل ترین سرعت" نامیده میشود. این بدان معنی است که در یک سیستم، ذرّات بیشتری دارای سرعت v_{mp} هستند. توجه داشته باشید می کند. سرعت می کند. می کند. معادله در ا



شکل (۲-۴) توزیع سرعت ذرّه در تعادل [۶۷].

برای دمای سیستم معلوم *T*، سرعتهای اولیّهی ذرّات برای شبیهسازی را میتوان براساس تابع چگالی احتمال در معادلهی (۲–۱۱) یا معادلهی (۲–۱۲) تعیین نمود. با شش عدد تصادفی یکنواخت، *R*6،...،*R*2،*R*1، مؤلفههای اولیّهی سرعت (*v*_{ix}, *v*_{iy}, *v*_{iz}) ذرّهی *i* را میتوان به شکل زیر تعیین نمود [۶۷]:

$$\begin{split} v_{ix} &= (-2\frac{kT}{m}\ln R_1)^{1/2}\cos(2\pi R_2) \\ v_{iY} &= (-2\frac{kT}{m}\ln R_3)^{1/2}\cos(2\pi R_4) \\ v_{iZ} &= (-2\frac{kT}{m}\ln R_5)^{1/2}\cos(2\pi R_6) \end{split}$$
(17-7)

¹ Most probable velocity

دمایی که با استفاده از سرعت اولیّهی ذرّات، که با روش فوق الذکر به دست میآیند، ارزیابی میشود تقریباً با دمای مطلوب سیستم برابر است؛ اما ممکن است لزوماً رضایتبخش نباشد. از اینرو، در یک برنامهی شبیهسازی واقعی قبل از شروع حلقهی اصلی، معمولاً یک رهیافت موازنه ضروری است.

۲-۵- شرایط مرزی تناوبی

خوشبختانه، یک سیستم با اندازهای از مرتبهی یک مول، متشکل از حدودا^{ً ۲۰}۲۳ × ۶ ذرّه، هر گز لازم نیست که مستقیماً در شبیه سازی های مولکولی برای تعادل ترمودینامیکی بررسی شود. به کار گیری شرط مرزی تناوبی، که در ادامه توضیح داده می شود، ما را قادر می سازد که تنها یک سیستم نسبتاً کوچک شامل حدوداً ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ ذرّه را، به منظور تحصیل چنان نتایج معقولی که داده های تجربی متناظر را با دقت توصیف نماید، بررسی نماییم. شکل (۲–۵) به طور شماتیک، مفهوم شرط مرزی تناوبی برای یک سیستم دوبعدی متشکل از ذرّات استوانه-کروی را نشان می دهد. مربع مرکزی یک ناحیهی شبیه سازی است و مربعهای پیرامون، جعبه های شبیه سازی مجازی هستند، که با تکرار جعبه ی شبیه سازی اصلی ساخته می شرط سازی اصلی ساخته می شوند. همان طور که در شکل (۲–۵) نشان داده شده است، مبدأ سیستم مختصات شریه سازی اصلی ساخته می شوند. همان طور که در شکل (۲–۵) نشان داده شده است، مبدأ سیستم مختصات ترتیب با x در مرکز ناحیهی شبیه سازی فرض می شود، و ابعاد ناحیهی شبیه سازی در جهتهای x و Y به ترتیب با x L و y L نشان داده می شوند. در بررسی شرط مرزی تناوبی، انجام دو اقدام ویژه ضروری است: اول، بررسی ذرآتی که از سطوح مرزی ناحیهی شبیه سازی می گذرند؛ و دوم، محاسبهی انرژی های برهمکنش یا نیروها با ذرآت مجازی موجود در جعبه های شبیه سازی تکرار شده [۶۷].

همان طور که در شکل (۲–۵) نشان داده شده است، ذرّهای که از سطح مرزی چپ عبور می کند و خارج می شود، باید از جعبه ی مجازی راست وارد شود. این رفتار را می توان با استفاده از زبان فرترن به صورت زیر بیان نمود [۶۷]:



شکل (۲–۵) شرایط مرزی تناوبی. وقتی که ذرّهای از جعبه شبیهسازی بیرون میرود یک ذرّه دیگر از سمت مخالف وارد جعبه شده و جایگزین آن میگردد. در محاسبه برهمکنش ذرّات در محدوه برش، هر دو همسایهی واقعی و مجازی به حساب میآیند [۷۴].

با استفاده از تابع گِرد کردن DNINT می توان جملات فوق را به صورت یک عبارت سادهی یک سطری به شکل زیر بیان نمود:

RXI=RXI-DNINT(RXI/LX)*LX

موقعیت ذرّهی i با (RXI, RYI) نشان داده می شود. عمل مشابهی را باید برای جهتهای y و z انجام داد.

وقتی که انرژی برهم کنش یا نیروی ذرّهی *i* با ذرّات دیگر، مثلاً ذرّهی *j*، محاسبه می شود، یک ذرّهی مناسب *j* باید در میان ذرّههای واقعی و مجازی انتخاب شود. این کار ممکن است به گونهای انجام شود که فاصلهی بین ذرّهی *i* و ذرّهی *j* کمینه باشد. این عمل را می توان با استفاده از زبان فرترن به صورت زیر بیان کرد [۶۷]:

IF (RXIJ.GT.LX/2.D0) THEN RXIJ=RXIJ-LX ELSE IF (RXIJ.LT.-LX/2.D0) THEN RXIJ=RXIJ+LX END IF با استفاده از تابع گِرد کردن DNINT عبارات فوق را می توان با عبارت ساده ی یک سطری زیر جایگزین نمود:

که در آن RXIJ=RXI-RXJ، موقعیت نسبی ذرّهی i نسبت به ذرّهی j را بیان میکند. عمل مشابهی را باید برای جهتهای y و z نیز انجام داد.

RXIJ=RXIJ-DNINT(RXIJ/LX)*LX

۲-۶- کاهش زمان محاسبه: فاصله برش

یک مفهوم مهم در متدلوژی شبیهسازی این است که یک محدودیت مؤثر در محاسبهی انرژیهای برهمکنش یا نیروهای بین ذرّات به کاهش خارقالعادهای در زمان شبیهسازی منجر میشود. معمولاً در انجام شبیهسازی دینامیک مولکولی پتانسیل بین اتمی U را به صورت مجموع برهمکنشهای جفتگونه $u(r_{ij})$ انجام شبیهسازی دینامیک مولکولی پتانسیل بین اتمی U را به صورت مجموع برهمکنشهای جفتگونه ور $u(r_{ij})$ انجام شبیهسازی دینامیک مولکولی پتانسیل بین اتمی U را به صورت مجموع برهمکنشهای جفتگونه ور $u(r_{ij})$ در نظر میگیرند. در این رابطه i_{ij} فاصله بین ذرّات $i \in j$ و (i_{ij}) . پتانسیل برهمکنش جفتی است که پتانسیل نیروی مرکزی بوده و تابعی از فاصله بین دو ذرّه میباشد. در سیستم شامل اتم یا مولکول، جمع دوگانه در رابطه فوق، جمع روی 2/(1 – N) جفت برهمکنش میباشد. میباشد. میباشد. بنابراین، اگر همه برهم کنشهای جفت در طول شبیه ازی نمونه گیری شوند، تعداد این نمونه- میباشد. ها با مجذور تعداد اتمها افزایش میبابد. لذا اگر محدوده مجاز برهمکنش بین اتمها افزایش یابد، یعنی

از r به Δr افزایش می یابد [۷۳]. یعنی: $r + \Delta r$ افزایش می یابد (۷۳]. یعنی:

$$N(r,\Delta r) \approx \rho V(r,\Delta r) \approx 4\pi r^2 \Delta r$$

که ρ چگالی تعداد، $(r, \Delta r)$ تعداد اتمها در لایه کروی به شعاع r و ضخامت Δr و $(r, \Delta r)$ حجم لایه میباشند. از طرف دیگر، پتانسیلهای جفتی کوتاه برد با افزایش فاصلههای بین مولکولی به سرعت کاهش یافته و به صفر میل میکنند. برای مثال، پتانسیل لنارد-جونز در فاصلههای بیشتر از σ ۲/۵ به سرعت به صفر نزدیک میشود. لذا میتوان از برهمکنشهای جفتی در فاصلههای بزرگتر از σ

صرفنظر کرد. فاصله σ ۲/۵ را فاصله (شعاع) برش^۱ مینامند و با r_c نمایش میدهند. فاصله برش، فاصله یادد-فاصلهای است که در فواصل بیشتر از آن، جفت ذرّات یکدیگر را نمی بینند. در مورد پتانسیل لنارد-جونز، با اعمال فاصله برش تابع این پتانسیل و نیروی ناشی از برهم کنش بین دو ذرّه به صورت زیر تعریف می گردند:

$$U(r) = \begin{cases} 4\varepsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right\} & r \le r_c \\ 0 & r > r_c \end{cases}$$
(14-7)

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} = \begin{cases} \frac{24\varepsilon}{\sigma} \left\{ 2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^7 \right\} & r \le r_c \\ 0 & r > r_c \end{cases}$$
(10-7)

که در آن، σ و z پارامترهای ثابت تابع پتانسیل، r_c شعاع برش و r فاصلهی بین دو ذرّه میباشند.

اثرات قطع كردن پتانسيل

به خاطر قطع شدن پتانسیل در r_c ، شبیهسازی بخشی از خواصی نظیر انرژی داخلی و فشار را که به طور مستقیم به پتانسیل وابسته هستند، محاسبه می کند. نتایج شبیهسازی باید برای برهم کنشهای بلندبرد r < r > r تصحیح شوند، چون که این نقاط در طول اجرای برنامه صرفنظر می شوند [۷۳]. هرگاه فاصله جدایی r_i بین اتمهای *i* و *j* بیشتر از r_c باشد، ضربههای کوچکی روی اتمهای *i* و *j* اعمال می شوند که ناشی از قطع نیرو در r_c است. در نتیجه انرژی کل ثابت نیست و افت و خیزهای در انرژی مشاهده می گردد. این افت و خیزها اثر کمی بر خواص تعادلی دارند و البته برای کم کردن اثرات این افت و خیزها می توان r_c را افزایش داد. لیکن در این صورت زمان لازم برای اجرای برنامه شبیهسازی سیستم افزایش می یابد.

۲-۷- کنترل دما و فشار در شبیهسازی دینامیک مولکولی

¹ cutoff distance

وقتی که تنظیم دما در سیستم انجام نمیشود، یکی از معیارهای سنجش دقت انتگرال گیری معادلات حرکت ذرّات این است که انرژی سیستم پایسته بماند. به زبان ترمودینامیک، گفته میشود شبیهسازی در آنسامبل میکروکانونی^۱ یا NVE انجام شده است. به عبارت دیگر، تعداد ذرّات (N)، حجم (V) و انرژی سیستم (E) ثابت هستند. شبیهسازی دینامیک مولکولی در آنسامبل میکروکانونی، سادهترین شبیهسازی است؛ اما، اگر هدف شبیهسازی ما تقلید شرایطی است که در آن سیستمها به طریق تجربی شبیهسازی است؛ می شود نیزین سادهترین شبیهسازی است؛ اما، اگر هدف شبیهسازی ما تقلید شرایطی است که در آن سیستمها به طریق تجربی بررسی میشوند؛ آنسامبل میکروکانونی لزوماً مناسبترین نیست. مخصوصاً، معمول این است که ترمایش می می شوند؛ آنسامبل میکروکانونی لزوماً مناسبترین نیست. مخصوصاً، معمول این است که آزمایشها تحت شرایطی انجام شوند که در آن دما و یا فشار محیط ثابت باشند. آنسامبلهای آزمایشها تحت شرایطی انجام شوند که در آن دما و یا فشار محیط ثابت باشند. آنسامبل دما آزمایشها تحت شرایطی انجام شوند به ترتیب آنسامبل کانونی یا NVR، آنسامبل دما آزمایشها تحت شرایطی انجام شوند که در آن دما و یا فشار محیط ثابت باشند. آنسامبل دما آزمایشها تحت شرایطی انجام شوند که در آن دما و یا فشار محیط ثابت باشند. آنسامبل دما آزمایشها تحت شرایطی دما فشار ثابت-آنتالپی ثابت یا NPR هستند [NVn، آنسامبل دما ثابت باشند. آنسامبل دما ثابت باشند. آنها T و ثابت-فشارثابت یا NPR، و آنسامبل فشار ثابت-آنتالپی ثابت یا NPR هستند [NP، آنسامبل دما ثابت مدارثابت یا NPR، و آنسامبل فشار ثابت-آنتالپی ثابت یا NPR هستند [NPR، آنسامبل دما ثابت مدارثابت یا NPR، و آنسامبل فشار و آنتالپی هستند. انواع آنسامبل ها و توضیحات مربوطه در بخش الف-

دیدگاه اساسی این است که سیستمی که میخواهیم شبیهسازی کنیم در حقیقت ایزوله نیست، بلکه با یک حمام خارجی برهم کنش دارد یا جفت شده است. در شبیهسازی تحت آنسامبل میکروکانونی، انرژی ثابت میماند و دما تغییر میکند. جفت شدگی با یک سیستم خارجی به این معنی است که انرژی میتوان به سیستم یا از آن منتقل شود و بنابراین انرژی آن تغییر میکند. این انتقال انرژی است که به الگوریتم اجازه کنترل دما را میدهد که به طرز صحیحی باید فرمول بندی شود.

برندسن^۲ و همکارانش [۷۶] برای صورت بخشیدن به این جفتشدگی، عبارت زیر را برای معادله حرکت مربوط به سرعت اتمها، **۷**، پیشنهاد نمودند:

$$\dot{\boldsymbol{V}} = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{F} + \frac{1}{2\tau_T} \left(\frac{T_B}{T} - 1\right) \boldsymbol{V}$$
(19-7)

¹ Microcanonical

² Berendsen

که در آن، T_{a} دمای مرجع، که دمای حمام گرمایی خارجی است، T دمای لحظهای سیستم، τ_{T} ثابت جفتشدگی (با واحد زمان)، M جرم ذرّات و F نیروی وارد شده به ذرّات هستند. این جمله ی اضافی که به معادلات حرکت اضافه شده است، مانند یک نیروی اصطکاک عمل میکند. وقتی که دمای واقعی سیستم از دمای مطلوب بزرگتر است، نیرو منفی است. این نیرو باعث میشود حرکت اتمها میرا شود و انرژی جنبشی و در نتیجه دما کاهش یابد. اگر دما کمتر باشد، عکس این عمل اتفاق میافتد، زیرا نیروی اصطکاک مثبت است و انرژی به سیستم داده میشود. ثابت جفتشدگی، τ_{T} ، شدّت جفتشدگی با حمام گرمایی را تعیین میکند. برای مقادیر بزرگ τ_{T} ، جفتشدگی ضعیف است و دمای سیستم به آهستگی به سمت دمای حمام رانده میشود. برای مقادیر کوچک، جفتشدگی قوی تر است و دینامیک سیستم سریعتر تغییر میکند.

اصول مربوط به کنترل فشار مشابه اصول کنترل دما است. فرق اصلی این است که کنترل فشار از طریق اصلاح معادله حرکت مربوط به مختصات و حجم سیستم، *V*، عمل میکند. معادلات حرکت کنترل فشار که توسط برندسن^۱ و همکارانش [۷۶] پیشنهاد شد عبارتند از:

$$\dot{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{V} - \frac{\beta}{3\tau_P} (P_B - \mathcal{P})\boldsymbol{R}$$

$$\dot{\boldsymbol{V}} = -\frac{\beta}{\tau_P} (P_B - \mathcal{P})\boldsymbol{V}$$
(1V-T)

که در آن، P_B فشار مرجع و P فشار لحظهای میباشند. پارامترهای β تراکم پذیری هم دمای سیستم است که واحد آن عکس فشار میباشد و τ_p ثابت جفت شدگی فشار است که واحد آن زمان میباشد. نسبت این دو پارامتر، $\frac{\beta}{\tau_p}$ ، است که اندازه جفت شدگی سیستم به حمام فشار خارجی را تعیین می کند. اگر فشار واقعی از فشار مطلوب کمتر باشد، سیستم منقبض می شود؛ در حالی که اگر فشار واقعی بزرگتر باشد، سیستم منبسط می شود. فشار لحظهای را می توان مشابه با دمای لحظهای تعریف نمود [۷۵]. بنابراین، فشار ترمودینامیکی، P، متوسط فشار لحظهای است:

¹ Berendsen

$$\mathbf{P} = \langle \mathcal{P} \rangle \tag{1}\lambda - \Upsilon$$

عبارت مربوط به فشار ترمودینامیکی، P، در آنسامبل کانونی به صورت زیر است:

$$\mathbf{P} = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial V}\right)_T \tag{19-T}$$

که در آن \mathcal{F} انرژی آزاد هلمولتز و V حجم میباشند. میتوان نشان که معادلهی (۲–۱۹) معادل است با [۷۵]:

$$P = \frac{1}{3V} \langle 2K + W \rangle \tag{(Y--Y)}$$

U که در آن، K و W به ترتیب انرژی جنبشی و ویریال سیستم هستند. دومی با مشتق انرژی پتانسیل U نسبت به حجم متناسب است:

$$W = -3V\frac{\partial U}{\partial V} \tag{(1-7)}$$

البته برای شکلهای خاصی از انرژی پتانسیل (مانند برهم کنشهای جفتی) عبارتهای روشنتری برای ویریال میتوان به دست آورد. فرمولهای بالا تنها برای سیستم ایزوتروپیک درست است که در آن فشار در همه جهتها به طور یکسان عمل میکند. در حالت کلی سیستم غیرایزوتروپیک، فشار به صورت تانسور نوشته میشود. این تانسور که ۹ مؤلفه دارد گاهی با عنوان تانسور تنش شناخته میشود. شکل آن به صورت زیر است:

$$\underline{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$
(17-7)

فشار در حالت ایزوتروپیک برابر با یک سوم trace (مجموع درایههای قطر اصلی) تانسور تنش است: $\mathcal{P} = \frac{1}{3} \left(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} \right)$ (۲۳-۲)

در راستای ایجاد یک الگوریتم دما-ثابت برای شبیهسازی دینامیک مولکولی، تکنیکی ابتدا توسط نوز ^۱ [۷۷] پیشنهاد شد و سپس توسط هوور ^۲ [۸۷] و توسط مارتین^۳، کلین^۴ و توکرمن^۵ [۷۹] توسعه داده شد. اساس روش این است که یک درجه آزادی با ترموستات اضافی درست شود که نمایان گر حمام گرمایی خارجی باشد. در الگوریتم اصلی نوز-هوور، تنها یک مختصه حمام، η ، و یک ممان متناظر با آن، p_{η} ، اضافه بر مختصات و ممانهای اتمی وجود دارد. معادلات حرکت اصلاح شده برای سیستم ترکیب یا توسعه یافته به صورت زیر هستند [۷۵]:

$$\dot{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{P} \tag{(Y f-Y)}$$

$$\dot{\boldsymbol{P}} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{R}) - \frac{p_{\eta}}{Q_{\eta}}\boldsymbol{P}$$
(Ya-Y)

$$\dot{\eta} = \frac{p_{\eta}}{Q_{\eta}} \tag{(YF-T)}$$

$$\dot{p}_{\eta} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{M}^{-1} \boldsymbol{P} - N_{\rm df} k_{\rm B} T \tag{(Y-Y)}$$

که در آن، N_{df} تعداد درجات آزادی مختصات است. پارامتر Q_{η} جرم ترموستات است که اندازه جفت-شدگی را تعیین می کند. از نظر فیزیکی، متغیر ممان، p_{η} ، در معادلهی (۲–۲۵) مانند یک ضریب اصطکاک عمل می کند. وقتی که مقدار آن صفر است، انرژی جنبشی سیستم میرا می شود، و وقتی منفی است، انرژی جنبشی افزایش می یابد. مقدار p_{η} توسط معادلهی (۲–۲۷) تعیین می شود که سمت راست آن متناسب با اختلاف بین دمای واقعی و دمای مطلوب است. مشاهده شد که در بعضی حالتها کنترل دما ضعیف یا ناکافی است. این موضوع باعث شد مارتین و همکاران [۷۹]، با معرفی زنجیره ترموستاتها، اضافه نمودن درجات آزادی دما را پیشنهاد کنند. معادلات آنها به صورت زیر است [۷۵]:

$$\dot{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{P} \tag{(Y \wedge -Y)}$$

- ³ Martyna
- ⁴ Klein
- ⁵ Tuckerman

¹ Nosé

² Hoover

$$\dot{\boldsymbol{P}} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{R}) - \frac{p_{\eta_1}}{Q_{\eta_1}} \boldsymbol{P}$$
(29-7)

$$\dot{\eta}_i = \frac{p_{\eta_i}}{Q_{\eta_i}} \quad \forall \quad i = 1, \dots, M$$
($\Upsilon \cdot -\Upsilon$)

$$\dot{p}_{\eta_1} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{M}^{-1} \boldsymbol{P} - N_{\rm df} k_{\rm B} T - p_{\eta_1} \frac{p_{\eta_2}}{Q_{\eta_2}} \tag{(1-1)}$$

$$\dot{p}_{\eta_j} = \frac{p_{\eta_{j-1}}^2}{Q_{\eta_{j-1}}} - k_B T - p_{\eta_j} \frac{p_{\eta_{j+1}}}{Q_{\eta_{j+1}}} \quad \forall \quad j = 1, \dots, M-1$$
(TY-Y)

$$\dot{p}_{\eta_M} = \frac{p_{\eta_{M-1}}^2}{Q_{\eta_{M-1}}} - k_B T \tag{(TT-T)}$$

که در آن، M تعداد کل ترموستاتها است. در کنترل فشار، همه روشها حجم سیستم را تغییر میدهند. یکی از الگوریتمهای کنترل فشار، الگوریتم اندرسن ^۱ است که حجم جعبه شبیهسازی را به عنوان متغیری دینامیکی اضافی معرفی نمود. معادلات او عبارتند از [۷۵]:

$$\dot{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{P} + \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\boldsymbol{R} \tag{(3.14)}$$

$$\dot{\boldsymbol{P}} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{R}) - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\boldsymbol{P}$$
(٣Δ-٢)

$$\ddot{V} = \frac{1}{W} (\mathcal{P} - P_B) \tag{(79-7)}$$

که در آن، W "جرم" حجم یا درجه آزادی باروستات است که واحد آن جرم بر توان چهارم طول است. هامیلتونی متناظر با این سیستم از معادلات، H_A، پایسته است و عبارت است از:

$$H_{\rm A} = \mathrm{H} + \frac{1}{2} \mathrm{W} \dot{\mathrm{V}}^2 + \mathrm{P}_{\mathrm{B}} \mathrm{V} \tag{(\Upsilon V - \Upsilon)}$$

اندرسن نشان داد که این معادلات مسیری متناطر با آنسامبل همفشار-همانتالپی (NPH) تولید می کند. بعداً، هوور آنها را با اضافه نمودن متغیرهای ترموستات اصلاح کرد به طوری که آنسامبل NPT را بتوان ساخت. اصلاحات بیشتری در این الگوریتمها توسط مارتین و همکارانش پیشنهاد شده است [۷۵].

¹ Andersen

۸-۸- معادلهی حرکت و الگوریتم دینامیک مولکولی

روش دینامیک مولکولی برای پدیدههای فیزیکی تعادلی و غیرتعادلی قابل اعمال میباشد که آن را به ابزار محاسباتی قدرتمندی تبدیل میسازد به طوری که میتوان جهت شبیهسازی بسیاری از پدیدههای فیزیکی، البته اگر توان محاسباتی کافی باشد، به کار گرفت. در شبیهسازی دینامیک مولکولی از معادلات کلاسیک نیوتن برای تعیین و دنبال نمودن حرکت ذرّات یک سیستم استفاه میگردد. از آنجا که تعداد ذرّات سیستم تحت شبیهسازی زیاد بوده و بین آنها برهمکنش وجود دارد، برای تعیین مشخصات حرکتی آن ملزم به استفاده از کامپیوتر میباشیم. هرچه توان محاسباتی کامپیوتر بیشتر باشد سیستم-های بزرگی را میتوان شبیهسازی کرد.

در روش دینامیک مولکولی موقعیت مکانی و زمانی و همچنین سرعت هر ذرّه بر اساس قانون دوم نیوتن با استفاده از یک الگوریتم انتگرال گیری عددی به دست میآیند. در هر گام زمانی از فرآیند شبیه سازی، با مشتق گیری از تابع پتانسیل تعریف شده، نیروی اعمال شده بر هر ذرّه و در نتیجه شتاب آن محاسبه می گردد و سپس سرعت و مکان آن به دست میآید. اگر جرم ذرّهی *i*ام با m_i و نیرویی که توسط ذرّات پیرامون و میدان خارجی به ذرّهی *i*ام وارد می شود با f_i نشان داده شوند، آنگاه حرکت یک ذرّه به وسیلهی معادلهی حرکت نیوتن توصیف می گردد [۶۷]:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = f_i$$
 (۳۸–۲)
در صورتی که یک سیستم از *N* ذرّه تشکیل شده باشد، *N* دسته معادلات مشابه وجود خواهد داشت و
حرکت *N* مولکول به واسطهی نیروهایی که بین آنها عمل میکنند روی یکدیگر اثر میگذارند. برای
حلّ معادلهی دیفرانسیل (۲–۳۸) توسط کامپیوتر، لازم است که به یک معادلهی جبری تبدیل گردد.
بدین منظور، جملهی دیفرانسیل مرتبهی دوم را باید با استفاده از بسط سری تیلور به صورت یک عبارت
جبری بیان کرد [۶۷]:

$$x(t+h) = x(t) + h\frac{dx(t)}{dt} + \frac{1}{2!}h^2\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \frac{1}{3!}h^3\frac{d^3x(t)}{dt^3} + \cdots$$
 (٣٩-٢)

بر اساس این معادله، x در زمان h + t را میتوان به صورت مجموع خود x، دیفرانسیل مرتبه اول، دیفرانسیل مرتبه دوم و غیره، با ضرب هر جمله آن در مقدار ثابتی، نوشت. در صورتی که x به طرزی چشم گیر نسبت به زمان تغییر نکند، برای مقادیر به اندازهی کافی کوچک از فاصلهی زمانی h میتوان از جملههای دیفرانسیلی مرتبه بالاتر صرفنظر کرد. در صورتی که دیفرانسیلهای مرتبه اول و دوم موقعیّت را به ترتیب برابر با سرعت و شتاب در نظر بگیریم، حذف جملههای دیفرانسیل مرتبه سوم و بالاتر در معادلهی (۲–۳۹) به معادلهی زیر منجر میشود:

$$\boldsymbol{r}_{i}(t+h) = \boldsymbol{r}_{i}(t) + h\boldsymbol{v}_{i}(t) + \frac{h^{2}}{2m_{i}}\boldsymbol{f}_{i}(t)$$
(f.-7)

این معادله، موقعیّت مولکول ها را تعیین می کند، اما جملهی سرعت در سمت راست ظاهر می شود. بنابراین معادلهای دیگر برای تعیین سرعت ضروری است. دیفرانسیل مرتبه اول سرعت برابر با شتاب می باشد:

$$\boldsymbol{v}_i(t+h) = \boldsymbol{v}_i(t) + \frac{h}{m_i} \boldsymbol{f}_i(t) \tag{(f)-f}$$

به منظور بهبود دقت، با اصلاح جزئی جملهی نیرو در معادلهی (۲-۴۱)، معادلهی زیر به دست میآید [۶۷]:

$$\boldsymbol{v}_i(t+h) = \boldsymbol{v}_i(t) + \frac{h}{2m_i} \left(\boldsymbol{f}_i(t) + \boldsymbol{f}_i(t+h) \right) \tag{97-7}$$

رهیافت اعمال معادلههای (۲–۴۰) و (۲–۴۱) برای تعیین حرکت مولکولها را "روش سرعت ورلت"^۱ مینامند. روش سرعت ورلت از نظر پایداری و دقت شبیهسازی به طرز چشم گیری بهتر است [۶۷]. در شبیهسازیهای انجام شده در رسالهی حاضر از این روش برای تعیین حرکت سیستمهای مدل استفاده می گردد. مراحل انجام شبیهسازی دینامیک مولکولی با استفاده از روش سرعت ورلت به شرح زیر می باشند:

¹ Velocity Verlet method

در فرآیند بالا، در شبیهسازی دینامیک مولکولی، موقعیّتها و سرعتها در هر فاصلهی زمانی h محاسبه میشوند.

۹-۲- محاسبهی تنش در شبیهسازی دینامیک مولکولی

از تنش ویریال برای محاسبهی تنش استفاده می گردد. مؤلفههای تانسور تنش ویریال برای سیستمی از اتمها به صورت زیر تعریف می شود [۲۰۰]:

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left[-\sum_{i} m_{i} v_{i}^{\alpha} v_{i}^{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j \neq i} F_{ij}^{\alpha} r_{ij}^{\beta} \right]$$
(FT-T)

که در آن، V حجم سیستم، m_i و v_i جرم و سرعت ذرّهی i، F_{ij} نیروی بین اتمهای i و r_i فاصلهی بین آنها و α و β مؤلفههای مختصات کارتزین میباشند. معادلهی (۲–۴۳) را میتوان به صورت زیر نوشت:

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_{i} V_i \sigma_i^{\alpha\beta} \tag{64-7}$$

که در آن،

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{V_i} \left[-m_i v_i^{\alpha} v_i^{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} F_{ij}^{\alpha} r_{ij}^{\beta} \right] \tag{$\mathbf{f}_{\Delta-\mathbf{f}}$}$$

و

$$\sum_i V_i = V$$

 V_i از معادلهی (۲–۴۵) برای تعریف تنش در سطح اتمی متناظر با اتم i استفاده میشود، که در آن، V_i از معادلهی (۲–۴۵) برای ذرّات میباشد. جملهی حجم مؤثر اتم i است. جملهی اول معادلهی (۲–۴۳) ناشی از ارتعاش حرارتی ذرّات میباشد. جملهی دوم سمت راست معادلهی (۲–۴۳) ناشی از نیروهای بین اتمی میباشد.

فصل سوم

تحلیل رفتار مکانیکی نانوفلزات بلوری و نانوکامپوزیتهای فلزی بلوری

تقويت شده

۳–۱– مقدمه

فلزات بلوری به دلیل خواص مکانیکی خوبی که دارند دارای اهمیّت ویژهای بوده و کاربردهای وسیعی را در صنایع مختلف به خود اختصاص دادهاند. از طرفی، برای بهبود هر چه بیشتر خواص مکانیکی آنها، محققان همواره تلاش کردهاند تا با ترکیب با موادی قویتر مانند نانولولهها، خواص آنها را بهتر سازند. از طرف دیگر، با پیشرفت روزافزون نانوفناوری، خواص فلزات در مقیاس نانو هم به عنوان یکی از مواد مورد استفاده در این فناوری جدید مورد توجه محققان بوده است. لذا، امروزه بررسی خواص و رفتار مکانیکی فلزات بلوری در ابعاد نانو یکی از نیازهای پیشرفت و توسعهی فناوری نانو کمپوزیتهای فلزی در این فصل از رساله، خواص و رفتار مکانیکی فلزات در ابعاد نانو و همچنین نانوکامپوزیتهای فلزی تقویت شده با نانوساختارهای نانولولهی نیتریدبور و گرافن به روش شبیهسازی دینامیک مولکولی بررسی میگردد. ابتدا رفتار مکانیکی و مکانیزم تغییر شکل نانوآلومینیم تک-بلور با استفاده از آزمایشهای کشش و فشار مورد مطالعه قرار می گیرد. سپس در بخش بعدی، تأثیر افزودن نانولولهی نیترید بور بر رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت نانولولهی نیترید بور-آلومینیم بررسی می گردد. بعد از آن، خواص فشاری یک مادهی مهندسی جدید به نام نانوکامپوزیت لایهای فلز-گرافن و تأثیر حضور گرافن در مکانیزم تغییر شکل آن برای فلزات مختلف مورد بررسی قرار می گیرد.

۲-۲- تحلیل رفتار مکانیکی و تغییر شکل آلومینیم

۳-۲-۱ مقدمه

پیشرفت در علم و فناوری نانو، تولید و توسعه ی ابزار آلات و ماشین آلات در سطح نانو توأم با کاربردهای زیادی را فراهم نموده است. فلزات از جمله عناصری هستند که در سیستمهای نانوالکترومکانیک^۱ به کار برده می شوند که در آنها از عملکردهای الکتریکی و مکانیکی نانودستگاههایی مانند حسگرها، محرکها، چرخدندهها، شتاب دهندهها و غیره استفاده می گردد [۱۳، ۸۰، ۸۱]. لذا درک خواص مواد فلزی در ابعاد اتمی با استفاده از روشهای تجربی یا محاسباتی برای تحلیل و تولید این نانودستگاههای نوظهور ضروری به نظر می رسد. آلومینیم به عنوان دومین عنصر مورد استفاده به دلیل خواص ساختاریش دارای اهمیّت ویژهای است. به علاوه این که فلزات SPC از جمله آلومینیم که در تولید نانودستگاهها و مواد کامپوزیت به کار برده می شوند، مطالعه و تحلیل خواص مکانیکی آنها در سطح اتمی یک ضرورت می باشد [۱۳]. دینامیک مولکولی کلاسیک به عنوان ابزاری قابل اعتماد و قدر تمند در سطح اتمی [۸۸]، برای مدل سازی و شبیه سازی مکانیزم تغییر شکل الاستیک-پلاستیک مواد فلزی در شرایط مختلف بارگذاری توسط محققان زیادی به کار گرفته شده است [۶، ۱۰، ۲۸]. به عنوان مثال، اوزگان^۳ و دوروک^۳ آلومینیم را با استفاده از پتانسل ساتن-چن^{*} با برهم کنش چند-جسمی مدل-سازی کردند [۸۸]. آنها ساختارهای آمورف و بلوری با خنک سازی سریع و کند را با روش دینامیک

¹ Nanoelectromechanical systems (NEMS)

² Ozgen

³ Duruk

⁴ Sutton-Chen

مولکولی درست کردند و خواص ساختاری آنها را بررسی نمودند. محققان از روشهای دیگر هم مانند روشهای تجربی، چندمقیاسی و اجزاء محدود هم برای بررسی خواص مکانیکی فلزات استفاده کردهاند [۱۴، ۱۵، ۱۸]. در مورد کارهای قبلی انجام شده برای بررسی خواص فلزات در ابعاد نانو، در بخش فلزات بلوری در فصل اول توضیح بیشتری ارائه شده است.

۳-۲-۲ تابع پتانسیل و آماده سازی نمونهی آزمایش

در تحقیق حاضر، خواص کششی و فشاری آلومینیم تک-بلور با استفاده از شبیهسازیهای دینامیک مولکولی بررسی میشود. تأثیر دما و نرخ کرنش در تغییر شکل الاستیک-پلاستیک، سختی، استحکام و شکست ماده با انجام آزمایشهای فشاری و کششی مطالعه می گردد. نمودارهای تنش-کرنش، خواص مکانیکی شامل مدول الاستیک، نسبت پواسون و استحکام تسلیم را به دست آورده و سپس، مکانیزم تغییر شکل و شکل گیری نابجایی ^۱ درون ماده توضیح داده می شود.

در اینجا، برای توصیف برهم کنش بین ذرّات آلومینیم از پتانسیل EAM در معادلات (۲-۱) و (۲-۲) در فصل دوم استفاده می شود. پارامترهای ارائه شده توسط مندلف^۲ و همکارانش [۸۹] برای تعیین انرژی پتانسیل بین اتمها در تابع پتانسیل EAM به کار برده می شود.

به منظور مدلسازی و شبیهسازی نانوآلومینیم تک-بلور، یک نمونه یشبیهسازی از آلومینیم براساس ساختار مکعبی با وجوه مرکزدار (FCC) برای انجام آزمایشهای کشش و فشار مطابق شکل (۳–۱) ساخته میشود. این نمونه از ۶ سل واحد در راستاهای y و z و ۲۰ سل واحد در راستای xتشکیل شده است. محورهای x و z به ترتیب عمود بر سطوح بلوری (100)، (010) و (001) قرار گرفتهاند. این نمونه از ۳۱۲۰ اتم تشکیل شده است و ثابت شبکهی آن برابر با (Å) ۴/۰۵ قرار داده میشود [۱۲]. از نرمافزار دینامیک مولکولی لمپس^۳ [۱۰۰] برای انتگرالگیری معادلات حرکت و محاسبه تنش ها استفاده می شود.

¹ Dislocation nucleation

² Mendelev

³ Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)

شرایط مرزی نمونه در جهتهای $x \ z \ z$ تناوبی و در جهت v آزاد فرض میشوند. سرعتهای اولیّهی اتمهای آلومینیم که در تعادل ترمودینامیکی در دمای T هستند، براساس تابع توزیع گاوس با میانگین صفر تعیین میگردد. از ترموستات نوز-هوور برای کنترل دمای سیستم استفاده میگردد. برای فرآیند تعادل از آنسامبل NPT با فشار صفر و برای آزمایشهای مکانیکی از آنسامبل کاننی NVT استفاده میگردد. قبل از بارگذاری مکانیکی، سیستم با اجرای آن برای ۲۰۰۰ گام زمانی رها میگردد، تا انرژی پتانسیل آن به مقدار حداقل خود برسد. گام زمانی شبیهسازی برای دمای کاهش یافتهی $T = -T \ z$ بزرگتر از آن برابر با ۵ فمتو ثانیه و برای دماهای پایین تر برابر با ۱ فمتو ثانیه قرار داده میشود. این اختلاف برای این است که برای گامهای زمانی بزرگ در دماهای پایین به ویژه نزدیک به صفر، سیستم ناپایدار میشود. دلیل این امر میتواند این باشد که اتمها در این دماها با فرکانس بزرگتری حرکت میکنند. دمای کاهش یافته T به عنوان نسبت دمای سیستم (T) به دمای ذوب (T_m) آلومینیم بالک، یعنی $T_T = T/T_m$ فرض میشود. دامای ذوب آلومینیم برابر با ۲ فرکانس بزرگتری حرکت



شکل (۳-۱) پیکربندی اولیّهی نمونهی شبیهسازی با سطوح بلوری (100)، (010) و (001) به ترتیب در راستای محورهای *x* و *z*

۳۰۰ K بعد از رهاسازی نمونه، بار کششی با نرخ کرنش $s^{-1} s^{-1}$ در جهت x در دمای ثابت T = T به نمونه اعمال می گردد. سپس نمونه در معرض بار کرنش فشاری با همان نرخ کرنش قرار داده می شود. جدول (۳–۱) مقادیر به دست آمده برای مدول یانگ E، نسبت پواسون v و استحکام تسلیم σ_y به همراه مقادیر به دست آمده توسط سایر محققین جهت مقایسه را نشان می دهد. مطابقت خوبی

بین مدول یانگ و نسبت پواسون به دست آمده و مقادیر تجربی آنها برای آلومینیم بالک دیده می شود. توجیه این موضوع می تواند این باشد که در محدوده یا لاستیک از تغییر شکل، عیوب ساختاری فلزات بالک نقش تعیین کننده ای در خواص الاستیک ندارند. این موضوع، تطابق رفتار نانومدل با ماده ی واقعی در ناحیه یا لاستیک را نشان می دهد. مدول یانگ فشاری مقداری از مدول یانگ کششی بزر گ تر است؛ در حالی که استحکام کششی از استحکام فشاری خیلی بزرگ تر است. تنش تسلیم به دست آمده در این تحقیق و همچنین مقادیر به دست آمده توسط سایر محققین برای نانوآلومینیم از مقدار تجربی آن برای آلومینیم بالک خیلی بزرگ تر است. دلیل آن، این است که مدل عددی ساخته شده کامل و بی عیب و بدون ناخالصی است. از طرف دیگر، در حقیقت کوچک سازی مواد از مقیاس ماکرو به مقیاس چندین نانومتر، تغییرات زیادی را ممکن است در خواص مکانیکی ایجاد می ماید. چنین مشاهداتی برای نانومواد زیادی تاکنون دیده شده است [۱].

σ_y (GPa)	ν	E (GPa)	آزمایش	روش	
4/18	٠/٣٩	83/2	کشش	ديناميک مولکولی	تحقيق حاضر
۲/۹۶	۰/۳۶	۶۵/۶	فشار		
۶/۰		۷۹/۸	کشش	ديناميک مولکولی	مرجع [90]
۲/۳			کشش	ديناميک مولکولی	مرجع [16]
(MPa) いる・		۲۵/۳	کشش	اجزاء محدود	مرجع [18]
(MPa) て・٣		۷۹/۸	Nanoindentation		
(MPa) \	٠/٣۵	٧٠	تجربى	آلومينيم بالك	مرجع [91]

جدول (۳–۱) خواص مكانيكي نانوآلومينيم تك-بلور در مقايسه با نتايج ساير محققين.

۳-۲-۳ تأثیر نرخ کرنش

به منظور بررسی اثرات نرخ کرنش در مشخصات مکانیکی نانوآلومینیم، نمونه آزمایش ساخته شده در معرض بارگذاری های کششی و فشاری با نرخ کرنش های مختلف $5^{-1} = 10^{9} \, s^{-1}$ و $10^{10} \, s^{-1}$ و $10^{10} \, s^{-1}$ معرض بارگذاری های کششی و فشاری با نرخ کرنش های مختلف آرد می شوند. شکل (7^{-1}) وابستگی این قرار می گیرد. سپس مدول الاستیک E و نسبت پواسون v محاسبه می شوند. شکل (7^{-1}) وابستگی این کمیتها به نرخ کرنش برای شرایط بارگذاری کششی و فشاری را نشان می دهد. همان طور که در این

شکل دیده میشود تأثیر نرخ بارگذاری ناچیز است. مدول یانگ و نسبت پواسون با افزایش سرعت بارگذاری خارجی تقریباً بدون تغییر میباشند. نتایج شبیهسازی همچنین نشان میدهد که استحکام تسلیم ماده تقریباً مستقل از نرخ کرنش میباشد به جز اختلاف کوچکی که در روند تغییر برای نرخ کرنش بالای $^{-1} s^{-1} \cdots s^{-1}$ دیده میشود (شکل ۳–۳). رفتار مشابهی برای کرنش تسلیم نمونه به عنوان تابعی از نرخ کرنش مطابق جدول (۳–۲) مشاهده میشود. نتایج به دست آمده، انحراف کوچکی در وابستگی تنش و کرنش تسلیم برای نرخ کرنش بالا را نشان میدهد.



شکل (۳-۲) تأثیر نرخ کرنش در مدول یانگ و نسبت پواسون نانوآلومینیم تک-بلور برای آزمایش (الف) کشش و (ب)





شکل (۳-۳) تأثیر نرخ کرنش در استحکام تسلیم نانوآلومینیم تک-بلور در آزمایشهای کشش و فشار.

1.1.	١٠٩	١٠٨	١٠٧	Ė
• / \ • ۵	۰/۰۸۶	۰/۰۸۵	۰/۰۸۴	(کشش) \mathcal{E}_y
۰/۰۵۲	•/• 49	۰/۰۴۵	•/• 47	(فشار) \mathcal{E}_y

جدول (۳-۲) تأثیر نرخ بارگذاری در کرنش تسلیم نانوآلومینیم تک-بلور برای بارگذاریهای کششی و فشاری.

۳–۲–۴– تأثير دما

برای بررسی تأثیر دما، مجدداً آزمایشهای کشش و فشار بر روی نمونهی مدلسازی شده در دماهای مختلف در یک محدودهی وسیع از نزدیک صفر مطلق ($T_r = \cdot / \cdot$) تا نزدیک دمای ذوب ($T_r = \cdot / \cdot$) انجام می شوند. در هر کدام از این آزمایش ها، دمای سیستم با استفاده از ترموستات نوز-هوور با اعمال s^{-1} آنسامبل NVT بر روی سیستم کنترل می گردد. نمونه تحت بار گذاری های کششی و فشاری با نرخ قرار میگیرد. سپس با استفاده از دادههای به دست آمده از شبیهسازیها، خواص مکانیکی $\dot{arepsilon}=10^9$ محاسبه می شوند. شکل (۳–۴) نتایج به دست آمده برای مدول یانگ و نسبت یواسون به عنوان توابعی از دمای کاهش یافته از ۰/۰۱ تا ۰/۹ برای آزمایش کشش و فشار ساده را نشان میدهد. همانطور که در این شکل مشاهده می شود، برای هر دو بار گذاری کششی و فشاری، مدول یانگ به طور قابل ملاحظه-ای با افزایش دما از دمای اتاق ($T_r = \cdot / 7$) به دمای ذوب کاهش می ابد؛ در حالی که با کاهش دما به صفر مطلق، افزایش می یابد. در دماهای بالاتر، ماده، به دلیل افزایش انرژی جنبش و جنب و جوش ذرّات، رفتار نرمتر و مقاومت کمتری در مقابل بارهای کرنشی اعمال شده از خود نشان میدهند. در حالی که در دماهای پایینتر، انرژی جنبش نقش کمتری در تحرّک ذرّات داشته و انرژی پتانسیل موجود، آنها را محکم در کنار هم نگه داشته و مقاومت بیشتری را در مقابل انرژهای کرنشی اعمال شده به جا می گذارند. نسبت پواسون، با روندی معکوس، با افزایش دما کاهش می یابد و با کاهش دما افزایش می یابد. با افزایش دما، اتمها از انرژی جنبشی بالاتری برخوردار بوده و ماده رفتار نرمتری خواهد داشت. در نتیجه، با اعمال نیرو در جهت بارگذاری، راحت تر کشیده شده و در راستای عمود بر بارگذاری به شکل راحتتری جمع می شود. یعنی در ازای اعمال کرنش محوری، تغییر شکل عرضی بیشتری در ماده

ایجاد می گردد. ولی در دماهای پایین، عکس این حالت اتفاق می افتد. نتایج شبیه سازی به طور کلی تأثیر زیاد دما در خواص مکانیکی نانو آلومینیم را آشکار می سازد.

استحکام تسلیم نمونه به عنوان تابعی از دمای کاهش یافته برای هر دو بارگذاری کشش و فشار در شکل (۳–۵) نشان داده شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می شود، با افزایش دمای کاهش یافته از ۰/۰۱ تا ۰/۹، استحکام نمونه به مقدار زیادی کاهش می یابد. به طوری که با افزایش دما به نقطهی ذوب، استحکام کششی و فشاری ماده به سمت صفر (شبیه مایعات) میل می کند. نکتهی دیگر این که استحکام فشاری ماده از استحکام کششی آن در تمامی دماها کمتر است. این موضوع به خواص این که استحکام فشاری ماده از استحکام کششی آن در تمامی دماها کمتر است. این موضوع به خواص قرار می گیرند. با اعمال بار کششی بر سیستم، اتمها از هم دیگر فاصله گرفته و نیروی جاذبه بین آنها افزایش می یابد. با افزایش بار اعمالی، مقاومت ناشی از جاذبهی بین اتمها افزایش یافته و بار بیشتری برای تغییر شکل کششی آن مورد نیاز خواهد بود. این روند ادامه می یابد تا این که تنش اعمال شده به استحکام تسلیم غالب گشته و باعث تسلیم ماده از طریق ایجاد نابجایی ناشی از لغزش اتمها می شود که در نتیجهی آن، نظم ساختار بلوری ماده در راستای صفحات لغزش تغییر می یابد.

از طرف دیگر، در بارگذاری فشاری، اتمها به هم فشرده شده و با کمتر شدن فاصله، نیروی دافعه بین آنها افزایش یافته و مقاومت ماده در مقابل تغییر شکل افزایش مییابد. ماده نهایتاً در تنش تسلیم تسلیم شده و تغییر شکل پلاستیک ساختار اتمی آن آغاز می گردد. اختلاف ذاتی در پتانسیلهای برهم کنش کششی و فشاری درون ماده دلیل اختلاف در خواص کششی و فشاری ماده میباشد. جدول (۳-۳) وابستگی کرنش تسلیم به دمای سیستم را نشان میدهد. کرنش تسلیم با افزایش دما کاهش مییابد. علاوه بر این، برای بارگذاری فشاری، ماده در کرنش خیلی کمتری تسلیم بار اعمال شده میشود.



شکل (۳-۴) تأثیر دما در مدول یانگ و نسبت پواسون نانوآلومینیم تک-بلور در آزمایش (الف) کشش و (ب) فشار.



شکل (۳–۵) تأثیر دما در استحکام تسلیم نانوآلومینیم تک-بلور برای بارگذاری کششی و فشاری.

جدول (۳-۳) تأثیر دما در کرنش تسلیم نانوآلومینیم تک-بلور برای بارگذاریهای کششی و فشاری.

٠/٩	• /Y	•/۵	۰/٣	٠/١	• / •)	T _r
•/•۵	•/•٧٣	۰/• \ ۶	۰/۰۸۵	۰/۱۰۶	•/114	(کشش) <i>E_y</i>
•/• ۲٨	•/•٣٢	•/• ۴٨	•/•۴٨	•/•۵٣	۰/۰۶۱	(فشار) \mathcal{E}_y

۳-۲-۵- مکانیزم تغییر شکل

شکل (۳–۶) نمودارهای تنش–کرنش نمونهی تحت بارگذاری کششی و فشاری را برای نرخ کرنشهای مختلف و همچنین دماهای متفاوت سیستم نشان میدهد. همانطور که در شکلهای (۳–۶ الف و ب) دیده میشود، تأثیر نرخ کرنش در رفتار کششی و فشاری ماده قابل ملاحظه نیست، جز این که برای نرخ کرنش بزرگ $s^{-1} = 1 \cdot s^{-1}$ اختلاف کوچکی مشاهده میشود. نمونه در ابتدا به طور الاستیک کشیده شده و سپس تغییر شکل پلاستیک آن در نقطهی تسلیم با تشکیل و انتشار نابجایی ^۱ ذرات

¹ Dislocation

شروع می شود. نقطه ی اوج اوّل در نمودار تنش - کرنش، نقطه ی تسلیم ماده و همچنین ایجاد اوّلین انبجایی اتمی درون ماده را نشان می دهد. بقیه ی نقاط اوج در محدوده ی پلاستیک از نمودارهای تنش - کرنش و سقوط ناگهانی بعد از آنها تشکیل و انتشار مجدد نابجایی اتمها تحت بار اعمال شده را نشان می دهند. افزایش مجدد تنش بعد از هر نقطه اوج، مقاومت ماده در مقابل تغییر شکل پلاستیک بعدی را آشکار می سازد.



شکل (۳-۶) نمودار تنش-کرنش نانوآلومینیم و تأثیر نرخ کرنش برای بارگذاری کشش (الف) و فشاری (ب) و تأثیر دما برای بارگذاری کششی (ج) و فشاری (د).

تأثیر دمای سیستم از ۲۰/۱ = T_r تا ۲/۱ بر روی نمودار تنش-کرنش ماده در شکلهای (۳-۶ ج و د) به ترتیب در آزمایشهای کشش و فشار تک-محوری برای نرخ کرنش ^{1–} ۲^۰ ا = ٤ نشان داده شده است. نتایج به دست آمده وابستگی شدید تغییر شکل الاستیک-پلاستیک مادهی فلز به دما را آشکار میسازد. با افزایش دما، محدودهی الاستیک کاهش مییابد و تغییر شکل پلاستیک در کرنش کمتری اتفاق میافتد. با افزایش دما، نقطهی اوج نمودار تنش-کرنش به طور همزمان به سمت پایین و چپ حرکت میکند. به عبارت دیگر، استحکام تسلیم و کرنش تسلیم ماده کاهش مییابد. این موضوع، کاهش مقاومت ماده در مقابل بارهای کششی و فشاری اعمال شده به دلیل افزایش انرژی جنبشی و تحرّک ذرّات را نشان میدهد. به همین دلیل، ماده در انرژی کرنشی اعمال شدهی کمتری پدیدهی تسلیم و تغییر شکل پلاستیک را آغاز میکند.

شکل (۳–۷) مکانیزم تغییر شکل نمونه را برای هر دو آزمایش کشش (ستون سمت راست) و فشار (ستون سمت چپ) را در دمای اتاق و برای نرخ کرنش اعمال شدهی $s^{-1} s^{-1} = s^{-1}$ نشان میدهد. شکلهای بالا و پایین هر بخش از آن مکانیزم تغییر شکل و میدان کرنش برشی متناظر با آن را نشان میدهد. شکلهای (۳–۷ الف و د) به ترتیب تغییر شکل الاستیک نمونه درست قبل از نقطهی تسلیم در آزمایش کشش و فشار ساده می باشند. همچنین، شکل های (۳–۷ ب و ه) ماده تغییر شکل یافته درست بعد از نقطهی تسلیم را تحت بارگذاریهای خارجی کششی و فشاری نشان میدهند. شکل الحاقی بالایی در میانه شکل (۳-۷) مکانیزم تغییر شکل نمونه ی تحت کشش را با جزئیات بیشتر أشكار ميسازد. همانطور كه مشاهده ميشود، نابجايي اتمها در راستاي سطح لغزش، موجب تسليم ماده و در نتیجه تغییر شکل پلاستیک می شود. علاوه بر این، کشیدگی و نابجایی ذرّات منجر به تشکیل گلویی از سطح آزاد در راستای عرضی نمونه میشوند. شکل الحاقی پایین در میانهی شکل (۳–۷) مکانیزم تغییر شکل فلز تحت بار فشار تک-محوری را با نمای بزرگتر نمایان میسازد. تشکیل و انتشار نابجایی اتمها در راستای صفحهی تنش برشی حداکثر، مکانیزم تغییر شکل نمونهی تحت فشار را تشکیل میدهند. نتیجه این که برای هر دو شرایط بارگذاری تک-محوری اعمال شده، نابجایی در راستای تنش برشی حداکثر و صفحهی بلوری (101) مشاهده می گردد. سپس تغییر شکل در ناحیهی گلویی متمرکز گشته و سرانجام تحت بار اعمال شده، شکست نرم ماده در راستای صفحهی برشی حداکثر مطابق شکلهای (۳-۷ ج و و) اتفاق می افتد.



شکل (۳–۷) مکانیزم تغییر شکل نانوآلومینیم تک-بلور در T =۳۰۰ K و برای $s^{-1} = s$: (الف و د) تغییر شکل الاستیک نمونه تحت کشش و فشار قبل از تسلیم، (ب و ه) نابجایی ذرّات در تغییر شکل پلاستیک و (ج و و) مکانیزم شکست نمونه در راستای صفحهی تنش برشی، به ترتیب، برای بارگذاریهای کششی و فشاری.

۳-۲-۴- نتیجه گیری

در این بخش، مکانیزم تغییر شکل الاستیک-پلاستیک و همچنین تأثیر نرخ کرنش و دما در مکانیک نانوآلومینیم تک-بلور به عنوان یک فلز FCC نوعی با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. از پتانسیل نوع EAM برای تعیین انرژی برهمکنش و در نتیجهی نیروی بین اتمها استفاده شد. نمودار تنش-کرنش و مکانیزم تغییر شکل و خواص مکانیکی نمونه به دست آمد. به طور خلاصه، نکات زیر برای فلزات نانوبلور FCC به دست آمد:

- رفتار مکانیکی نانوآلومینیم با استفاده از پارامترهای پتانسیل EAM به کار گرفته شده برای هر
 دو شرایط بارگذاری کششی و فشاری با دقت خوبی قابل پیشبینی است.
- نرخ کرنش تأثیر قابل ملاحظهای بر خواص مکانیکی و تغییر شکل الاستیک-پلاستیک ماده در هر دو آزمایش کشش و فشار ندارد.

- دما در محدوه یبرسی شده تأثیر بزرگی در مکانیزم تغییر شکل و مشخصات مکانیکی نمونه برای هر دو آزمایش کشش و فشار دارد.
- تشکیل و انتشار نابجایی ذرّات و تشکیل گلویی در راستای عرضی، مکانیزم تغییر شکل و شکست ماده را تشکیل میدهند. سطوح لغزش در راستای صفحهی تنش برشی حداکثر برای هر دو بارگذاری کششی و فشاری مشاهده میشود. نرمی ماده از نابجاییهای شکل گرفته در سطح آزاد نمونه و انتشار آن نشأت میگیرد.

نتایج به دست آمده در این بخش خواص و رفتار فلزات نانوبلور FCC را بهتر از تحقیقات انجام شدهی قبلی و همچنین شدّت وابستگی به دما و نرخ کرنش کششی و فشاری تک-محوری را آشکار میسازد. به علاوه این که، مکانیزم نانوپلاستیسیتهی فلزات را با جزئیات بیشتر مورد بررسی قرار میدهد.

۳-۳- شبیهسازی نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانولولهی نیترید بور

۳–۳–۱– مقدمه

نانولولههای کربنی در دههی گذشته به دلیل خواص ساختاری متمایزشان توجه زیادی را به خود جلب کردهاند. امروزه، نانولولههای دیگری مانند نانولولههای تک-جداره و چند-جدارهی نیترید بور^۱ با قطرهای مشابه با نانولولههای کربن ساخته میشوند [۹۳، ۹۳]. تحقیقات تجربی نشان میدهد که نانولولههای نیترید بور دارای مدول یانگ قابل مقایسه با نانولولههای کربن هستند [۹۳]. پایداری در دمای بالا و استحکام کششی بالای نانولولههای نیترید بور، آنها را تبدیل به تقویت گرهای مناسبی برای تقویت مواد ماتریس به ویژه ماتریسهای فلزی می نماید. تحقیقات پیشین، تأثیر مثبت افزودن نانولولهی نیترید بور در تقویت و بهبود خواد مواد گوناگون را به خوبی نشان میدهند [۱۰، ۵۲، ۹۴-۹۶]. با وجود این، تعداد مطالعات گزارش شده در مورد نانوکامپوزیتهای تقویت شده با نانولولههای نیترید بور بسیار

¹ Boron-nitride nanotube
لاهیری^۱ و همکارانش [۹۶] کامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانولولهی نیترید بور را تولید کردند. نتایج آزمایش فشاری آنها، ۵۰٪ بهبود در استحکام ماتریس را نشان میدهد. لغزش، مکانیزم تغییر شکل در ماتریس آلومینیم بدون تقویت *گر* و همچنین تقویت شده با نانولوله بوده است که نشان دهنده رفتار نرمی ماده میباشد. علاوه بر این، نانولولهی نیترید بور توانسته است شرایط سخت دمایی و فشاری فرایند تولید را تحمل نماید.

در این بخش، از این تقویت گر برای ترکیب با ماتریس آلومینیم استفاده می گردد. تأثیر نانولولهی نیترید بور بر خواص مکانیکی فلز آلومینیم با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار می گیرد. بدین منظور، نمونه های مختلفی از نانوکامپوزیت نانولوله ینیترید بور –آلومینیم برای دو حالت متفاوت بلند (پیوسته) و کوتاه (ناپیوسته) از تقویت گر ساخته می شود و دو آزمایش کشش و فشار ساده بر روی آن ها انجام می شود. همچنین تأثیر شرایط مرزی مختلف در خواص نانوکامپوزیت ها بررسی می گردد.

۳-۳-۲- مدلسازی نمونههای آزمایش

برای توصیف برهم کنشهای اتمی بین عناصر نیتروژن و بور نانولولههای نیترید بور از تابع پتانسیل ترساف در معادلات (۲–۳) تا (۲–۹) استفاده می گردد. از مقادیر پارامترهای ترساف منتشر شده در مرجع [۲۷] برای محاسبه یانرژی پتانسیل بین ذرّات نانولوله استفاده می گردد. برای تعیین پتانسیل بین اتمهای آلومینیم ماتریس از تابع پتانسیل EAM در معادلات (۲–۱) و (۲–۲) استفاده می شود. از پارامترهای ارائه شده توسط مندلف^۲ و همکارانش [۸۹] برای تعیین انرژی پتانسیل بین اتمهای آلومینیم استفاده می شود.

-۱۲ برای توصیف برهم کنش غیرپیوندی بین اتمهای ماتریس و نانولوله، تابع پتانسیل لنارد-جونز σ و σ مطابق معادلهی (۲–۱۰) به کار گرفته می شود. برای تعیین پارامترهای این تابع پتانسیل یعنی σ و

¹ Lahiri

² Mendelev

B برای برهم کنش های بین *Al-N و Al-B و Al-A از* قاعده ی ترکیب لورنتز –برتلوت (که نحوه محاسبه آن در بخش ۴ – ۲ – ۲ از فصل چهارم آمده است) استفاده می شود. برای محاسبه ی آن ها مقادیر همین پارامترها برای اتم های یکسان آلومینیم، نیتروژن و بور مورد نیاز است. این مقادیر برای آلومینیم از مرجع [۹۷] و برای عناصر نیتروژن و بور از مراجع [۹۹ ، ۹۹] گرفته می شوند.

شکل (۳–۸ الف) نمودار شماتیک آلومینیم تقویت شده نانولولهی نیترید بور بلند و کوتاه به ترتیب از راست به چپ را نشان میدهد. مستطیلهای خطچین، نمایندهی حجم مدل میباشد که برای مدل-سازی و شبیهسازی نانوکامپوزیتها استفاده می گردد. شکل (۳–۸ ب) پیکربندی اولیّهی نمونهی آلومینیم تک-بلوری با ابعاد ۲/۷ Å^۳ ۵۲/۷×۵۲/۷ میاشد. شکل (۳-۸ ج) پیکربندی اولیّهی نمونه-ى نانوكامپوزيت آلومينيم تقويت شده با نانولولەي نيتريد بور بلند (با ساختار زيگزاگ (16,0)) با همان ابعاد هندسی نمونهی آلومینیم در شکل (۳–۸ ب) را نشان میدهد. در این حالت، طول نانولوله برابر Å ۱۱۷/۵ با کسر اتمی ٪۸/۶ و با شرط مرزی تناوبی میباشد. شکل (۳–۸ د) نیز پیکربندی اولیّهی نمونهی نانوكامپوزيت آلومينيم تقويت شده با نانولولهي نيتريد بور كوتاه (با ساختار زيگزاگ (16,0)) با ابعاد هندسی مشابه را نشان میدهد. در این حالت، طول نانولوله برابر Å ۷۲/۵ و دارای کسر اتمی %/%میباشد. شکل (۳–۸ ه) پیکربندی اتمی نانولولهی نیترید بور با ساختار بلوری زیگزاگ را نشان میدهد. از آنسامبل NPT برای به تعادل رساندن سیستم در فشار خارجی صفر دمای K ۲۰۰ و از آنسامبل کاننی ps^{-1} برای بارگذاری نمونهها استفاده می شود. بارگذاری های کششی و فشاری با نرخ کرنش NVT۰/۰۰۰۱ اعمال می شوند و از گام زمانی ۱ ps ۰/۰۰۱ برای انتگرال گیری معادلات حرکت استفاده می گردد. از الگوریتم نوز-هوور برای کنترل دما و فشار سیستم استفاده می شود و شبیه ساز دینامیک مولکولی لمیس [۱۰۰] برای اجرای شبیهسازیها به کار برده می شود.







اولیّهی بلوری آلومینیم (ب)، نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانولولهی نیترید بور بلند (ج) و کوتاه (د) و ساختار اتمی نانولولهی نیترید بور زیگزاگ (ه) که از دو عنصر نیتروژن (به رنگ تیره) و بور (به رنگ روشن) تشکیل میشود.

۳–۳–۳– تأثیر نانولولهی نیترید بور بلند

شکل (۳–۹) نمودارهای تنش–کرنش مهندسی به دست آمده برای نمونههای آلومینیم خالص و نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده با ۸/۶ درصد اتمی نانولولهی نیترید بور بلند در آزمایشهای کشش و فشار برای شرایط مختلف مرزی را نشان میدهد. شکلهای الحاقی داخل نمودارها، نوع بارگذاری و شرایط مرزی اعمال شده در راستای محورهای مختصات را نشان میدهند. همان طور که در شکل (۳– ۹ الف) دیده میشود نانولولهی نیترید بور بلند تأثیر زیادی در رفتار مکانیکی ماتریس آلومینیم در بارگذاری کششی دارد به طوری که سفتی و استحکام آن را به طور قابل ملاحظهای افزایش میدهد که در توافق با نتایج تجربی به دست آمده توسط خو^۱ و همکارانش [۹۵] هست. این تأثیر را میتوان به استحکام کششی بالای نانولولهی نیترید بور نسبت داد. نقطهی اوج اول، تسلیم ماتریس در مقابل بار اعمال شده را نشان میدهد. نقطه اوج پایانی نیز شکست نانولوله تحت بار کرنشی وارد شده را نشان میدهد. نوسانات بین این دو نقطه نیز فرآیند تغییر شکل پلاستیک ماتریس را نشان میدهد. مطابق شکل (۳–۹ الف) در حالت بارگذاری کششی، تأثیر شرایط مرزی در رفتار نمونههای کامپوزیت زیاد نیست. براساس شکل (۳–۹ ب)، تأثیر نانولولهی نیترید بور در استحکام فشاری ماتریس آلومینیم ناچیز است.



شکل (۳–۹) نمودار تنش-کرنش نمونههای آلومینیم خالص و نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانولولهی نیترید بور بلند برای آزمایش کشش (الف) و فشار (ب) برای شرایط مرزی مختلف. نمادهای S و P به ترتیب نشان دهندهی شرایط مرزی آزاد و تناوبی میباشند.

۳–۳–۴– تأثیر نانولولهی نیترید بور کوتاه

شکل (۳–۱۰) نمودارهای تنش–کرنش به دست آمده برای نمونههای نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده با ۵/۴ درصد اتمی نانولولهی نیترید بور کوتاه در شرایط مختلف بارگذاری کششی و فشاری برای شرایط مختلف مرزی را نشان میدهد. در اینجا نیز نمودارهای تنش–کرنش نمونههای خالص آلومینیم به منظور مقایسه نشان داده شدهاند. همانطور که در (۳–۱۰ الف) ملاحظه میشود نانولولههای کوتاه نمیتوانند مادهی ماتریس را تقویت نمایند، بلکه به دلیل برهمکنش ضعیف بین ماتریس و تقویت گر و همچنین



شکل (۳–۱۰) نمودار تنش-کرنش نمونههای آلومینیم خالص و نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانولولهی نیترید بور کوتاه برای آزمایشهای کشش (الف) و فشار (ب) برای شرایط مرزی مختلف. نمادهای S و P به ترتیب نشان دهندهی شرایط مرزی آزاد و تناوبی میباشند.

ایجاد فضای خالی در درون ماتریس، با افزودن نانولوله، استحکام کامپوزیت کاهش مییابد. شرایط مرزی نیز تأثیری در خواص نانوکامپوزیت نمی گذارند. براساس شکل (۳–۱۰ ب) نانولولهی نیترید بور کوتاه در آزمایش فشار، ماتریس آلومینیم را تقویت نمی کند. دلیل این امر، از یک طرف، برهم کنش ضعیف بین ذرّات ماتریس و نانولوله میباشد که با یک تابع پتانسیل غیرپیوندی لنارد–جونز مدلسازی شده است و از طرف دیگر حذف بخش مرکزی ماتریس جهت جاسازی نانولوله میباشد که مقاومت آن را در مقابل بار فشاری اعمال شده کاهش میدهد.

۳-۳-۵- تأثیر کسر اتمی

به منظور مطالعهی تأثیر کسر اتمی نانولولهی نیترید بور بلند در رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت، با تغییر اندازهی مدل، سه نمونه با کسرهای اتمی ٪۸/۶، $(\Lambda/5/1 \ e^{-1})^{1}$ از نانولوله با قطر ثابت Å ۱۲/۷۹ مدل اندازهی مدل، سه نمونه با کسرهای اتمی $(\Lambda/5/1 \ e^{-1})^{1}$ از نانولوله با قطر ثابت Å ۱۲/۷۹ مدل اندازه مدل مدل از می قرار می گیرند. کسر اتمی مدل سازی شده و تحت بار کششی و فشاری تک-محوری در راستای محور x قرار می گیرند. کسر اتمی مدل اندی محورت نسبت تعداد کل اتمهای نانوکامپوزیت تعریف می صورت نسبت تعداد اتمهای نیتروژن و بور در نانولوله به تعداد کل اتمهای نانوکامپوزیت تعریف می شود. با توجه به وزن اتمی عناصر آلومینیم، نیتروژن و بور، کسرهای اتمهای $(\Lambda/5/1 \ e^{-1})^{1}$ با ترمی می می می معادل با کسرهای وزنی $(\Lambda/5/1 \ e^{-1})^{1}$ می باشند. شکل (۳–۱۱ الف) نمودارهای تنش به تریش مهندسی به دست آمده برای نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانولولهی نیترید بور برای سه

کسر اتمی مختلف از نانولوله را نشان میدهد. همانطور که در این شکل مشهود است کسر اتمی نانولوله تأثیر قابل ملاحظهای در رفتار و خواص مکانیکی نانوکامپوزیت ایجاد میکند؛ به طوری که با افزایش آن، استحکام و سفتی نانوکامپوزیت افزایش می یابد. براساس جدول (۳-۴)، در آزمایش کشش، برای کسرهای اتمی ٪۸/۶، ٪۸/۵/ و ٪۲۹/۷، استحکام نانوکامپوزیت به ترتیب به میزان ٪۷۹/۴، ٪۲۶/۲۶ و ./۷/ ۴۵۰/۷ و مدول یانگ هم به ترتیب به میزان ./۸۲، ۱۴۱٪ و ۲۷۱٪ نسبت به ماتریس تقویت نشده افزایش می یابند. مطابق جدول (۳-۴) با افزایش درصد اتمهای نانولوله، نسبت پواسون به طور قابل ملاحظهای در هر دو بارگذاری کششی و فشاری کاهش می یابد. استحکام فشاری ماتریس آلومینیم برای کسر اتمی ٪۸/۶ به میزان ٪۱۹/۱ کاهش مییابد؛ ولی با افزایش کسر اتمی نانولوله به ٪۱۴/۵ و ٪۲۹/۷ به ترتیب به میزان ٪۱۸/۲ و ٪۵۴ نسبت به ماتریس تقویت نشده افزایش می یابد. دلیل کاهش استحکام برای کسر اتمی ٪۸/۶، برش بخش مرکزی ماتریس و ایجاد استوانه خالی در آن میباشد که مقاومت نهایی ماتریس در مقابل بار فشاری اعمالی را کاهش میدهد. لیکن، با افزایش بیشتر کسر اتمی نانولوله (با ثابت نگه داشتن قطر آن) استحکام نانوکامپوزیت افزایش می یابد. در آزمایش فشار، با افزودن نانولوله ی نيتريد بور، مدول الاستيک ماتريس به مقدار زيادي افزايش مي يابد؛ به طوري که مطابق جدول (۳-۴)، برای کسرهای اتمی ٪۸/۶، ٪۱۴/۵ و ٪۲۹/۷ به ترتیب به میزان ٪۸۵/۶، ٪۱۴۲/۵ و ٪۲۳۵/۳ افزایش می یابد. متفاوت بودن خواص کششی و فشاری ماتریس خالص و همچنین نانو کامیوزیت در جدول (۳-۴) قابل مشاهده است؛ به گونهای که استحکام کششی نانوکامپوزیت از استحکام فشاری آن بیشتر است. ولي در مورد سفتي آن، عكس اين حالت برقرار ميباشد. اين اختلاف، از يک طرف به خواص متفاوت کششی و فشاری ماتریس آلومینیم و از طرف دیگر به خواص متفاوت نانولوله در بارگذاریهای کششی و فشاری [۱۹۸] بر می گردد.



شکل (۳–۱۱) تأثیر کسر اتمی تقویت گر در نمودارهای تنش-کرنش نانوکامپوزیت نانولولهی نیترید بور بلند-آلومینیم برای کسرهای اتمی ٪۸/۶، ٪۸۶۲ و ٪۲۹/۷ از نانولوله در آزمایشهای کشش (الف) و فشار (ب) ساده.

کسر اتمی		• •	٨/۶ ⁻ /.	۱۴/۵٬	۲٩/٧%
ا ۲۰۰۰	کشش	4/81	٨٣٨	17/34	70/V7
استحكام	فشار	۵/۶۰	۴/۵۳	8/87	٨/۶٢
Б	کشش	$\Delta V/V$	۱۰۵	١٣٩	714
Ex	فشار	۶۶/٨	174	187	774
A A.	کشش	٠/٣۵	•/\X	•/١٢	• / • ۶
$v_{yx} = v_{zx}$	فشار	۰/۳۸	•/\٨	•/14	• • • • ۶

جدول (۳-۴) استحکام (GPa)، مدول الاستیک (GPa) و نسبت پواسون نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده برای کسرهای اتمی مختلف نانولولهی نیترید بور بلند در بارگذاریهای کششی و فشاری.

۳–۳–۶– تأثير قطر نانولوله

به منظور بررسی تأثیر احتمالی قطر نانولوله ی نیترید بور در خواص مکانیکی نانوکامپوزیت، سه نمونه ی کامپوزیت با قطرهای مختلف نانولوله مدلسازی شده و تحت بارهای کرنش کششی و فشاری قرار میگیرد. بدین منظور، سه نانولوله با قطرهای مختلف Å ۱۹/۱۹، ۹ ۱۹/۱۹ و ۲۵/۵۸ (البته با حفظ درصد اتمی تقویت گر ٪۸/۶) مدلسازی شده و به طور جداگانه با سه ماتریس آلومینیم ترکیب میشوند. شکل (۳–۱۲) نتایج به دست آمده از شبیه سازی ها برای نمودارهای تنش-کرنش نانوکامپوزیت ها در دو آزمایش کشش و فشار ساده را نشان می دهد. شکل (۳–۱۲ الف) تأثیر قطر نانولوله در رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت را نشان می دهد. همان طور که در این شکل مشهود است تغییر قطر تقویت گر تأثیر قابل نانوکامپوزیت تقویت شده برای قطرهای مختلف تقویت گر در دو آزمایش کشش و فشار ساده را نشان می دهد. براساس دادههای این جدول، تأثیر قطر نانولوله در خواص کششی نانوکامپوزیت قابل ملاحظه نیست. با افزایش قطر نانولوله از Å ۱۲/۷۹ به ۱۲/۷۸ به میزان ٪۴/۸ کاهش در مدول یانگ کششی کامپوزیت دیده می شود. لیکن، در بارگذاری فشاری، وابستگی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت به قطر نانولوله قابل توجه می باشد؛ به طوری که مقدار استحکام آن از ۴/۵۳ GPa برای قطر Å ۱۲/۷۹ به ماتریس نانولوله قابل توجه می باشد؛ به طوری که مقدار استحکام آن از ۴/۵۳ GPa برای قطر Å ۲۵/۵۸ به ماتریس نانولوله قابل توجه می باشد؛ به طوری که مقدار استحکام آن از ۳۵ ۳۵ ۲۸ برای قطر Å ۲۵/۵۸ به ماتریس نانولوله قابل توجه می باشد؛ به طوری که مقدار استحکام آن از ۳۵ ۳۵ ۲۸ برای قطر Å ۲۵/۵۸ به ماتریس خالص کاهش می باد؛ و به میزان ٪۶۰ نسبت به ماتریس ماتریس ماتریس می باد؛ و به میزان ٪۶۰ با افزایش قطر نانولوله، خالص کاهش پیدا می کند. در مورد مدول الاستیک نیز، مطابق جدول (۳–۵)، با افزایش قطر نانولوله، مقدار آن به اندازهی ٪۶۰ با نوری که مقدار استحکام آن از ۲۵۳ GPa برای کاهش می باد؛ و به میزان ٪۶۰ با نابولوله، خالص کاهش پیدا می کند. در مورد مدول الاستیک نیز، مطابق جدول (۳–۵)، با افزایش قطر نانولوله، مقدار آن به اندازهی ٪۶۰ نسبت به حالت اول (برای قطر Å ۱۲/۷۹) کاهش می باد؛ ولی هنوز به مقدار آن به اندازهی ٪۶۰ نسبت به ماتریس تقویت نشده افزایش دارد. این موضوع، متفاوت بودن رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت در بارگذاریهای کششی و فشاری را به وضوح نشان می دهد. بخشی از این اختلاف، به نانوکامپوزیت در بارگذاریهای کششی و فشاری را به وضوح نشان می دهد. بخشی از این اختلاف، به خواص ماتریس بر می گردد که دارای خواص کششی و فشاری متفاوتی است. بخش دیگر اختلاف، به خواص ماتریس بر می گردد که دارای خواص کششی و فشاری منه و نشاری متفاوتی است. بخش دیگر اختلاف، به خواص ماتریس بر می گردد که دارای خواص کششی و فشاری متفاوتی است. بخش دیگر اختلاف، به خواص ماتریس بر می گردد که دارای می و ماری می مرد (آما).



شکل (۳–۱۲) تأثیر قطر نانولولهی نیترید بور بلند در رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت برای سه قطر مختلف در بارگذاری-های کششی (الف) و فشاری (ب).

قطر نانولوله (Å)		• / •	1 Y/V 9	19/19	τ۵/۵λ
15 1	کشش	4/84	$\lambda/\Upsilon\lambda$	۲۴۳	$\lambda/\lambda V$
استحكام	فشار	۵/۶۰	4/27	۴/۱۶	٣/٣۵
Б	کشش	۵V/Y	۱۰۵	1 • 1	۱۰۰
Ex	فشار	88/N	174	١١٢	111
	كشش	۰/۳۵	•/\٨	٠/١۴	•/1۶
$v_{yx} = v_{zx}$	فشار	۰/۳۸	•/\٨	•/\٩	•/\٨

جدول (۳–۵) استحکام (GPa)، مدول الاستیک (GPa) و نسبت پواسون نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده برای قطرهای مختلف نانولولهی نیترید بور بلند در بارگذاریهای کششی و فشاری.

۳-۳-۷ مکانیزم تغییر شکل

شکل (۳–۱۳) مکانیزم تغییر شکل پلاستیک نمونههای آلومینیم خالص، نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده و نانولولهی نیترید بور بلند را برای بارگذاری کششی نشان میدهد. شکل (۳–۱۳ الف) سمت راست، تغییر شکل آلومینیم خالص بعد از تسلیم شدن در کرنش اعمالی ۱۸/۲ را نشان میدهد. شکل پایین، کرنش اتمی درون ماده را نشان میدهد، که در آن، تشکیل نابجایی و صفحهی لغزش در راستای تنش برشی حداکثر دیده میشود. شکل (۳–۱۳ الف) سمت چپ، تأثیر قابل توجه حضور نانولوله در شکل گیری و انتشار نابجاییها را نشان میدهد؛ به طوری که مقدار و شدت تغییر شکل پلاستیک ماتریس را به طور قابل ملاحظهای کاهش میدهد. رنگ قرمز اتمهای نانولوله، تغییر شکل پلاستیک ماتریس را به طور آن در تحمل بار وارد شده را به خوبی آشکار میسازد. اتمهای آلومینیم در مجاور تقویت گر که دارای رنگ قرمز میباشند تأثیر جاذبهی فصل مشترک بین ماتریس و تقویت گر را نشان میدهد.



شکل (۳–۱۳) مکانیزم تغییر شکل ماتریس خالص (سمت چپ) و نانوکامپوزیت نانلولهی نیترید بور بلند-آلومینیم (سمت راست) در بارگذاری کششی در کرنشهای (الف) ۱۲($=_{x}$ ، (ب) ۳($=_{x}$ و (ج) ۵($=_{x}$ ، (د) مکانیزم شکست نانولوله درون ماتریس در کرنش محوری ۲۸($=_{x}$ و (ه) نمای بزرگ شدهی ترک تشکیل شده در ماتریس خالص در شکل (ج). در این شکل، عناصر آلومینیم، نیتروژن و بور به ترتیب با رنگهای سبز، آبی و زرد نمایش داده شدهاند.

شکل (۳–۱۳ ب) سمت چپ، مکانیزم تغییر شکل پلاستیک آلومینیم خالص در راستای صفحات برشی حداکثر در کرنش اعمالی ۳/۰ را نشان میدهد. شکل سمت راست، شکست تقویت گر و در نتیجه نانوکامپوزیت در کرنش اعمالی ۳/۰ را نشان میدهد. به دنبال شکست نانولوله، بار اعمال شده، در ناحیهای از ماتریس (ناحیهی قرمز رنگ) متمرکز میشود. مطابق شکل (۳–۱۳ ج)، با کشیدن بیشتر نمونهها، آلومینیم خالص (سمت چپ) در راستای تنش برشی حداکثر شکسته میشود. شکل (۳–۱۳ در مورد نمونهی کامپوزیت، با ادامهی اعمال بار کششی، فصل مشترک ماتریس-تقویت گر نمی تواند نیروی برشی ناشی از بار خارجی را تحمل کند و در نتیجه نانولوله در درون ماتریس در راستای بار اعمالی (محور x) می لغزد. به طور همزمان، اتمهای ماتریس نیز در نواحی تمرکز تنش، دچار گسیختگی می شوند. شکل (۳–۱۳ د) مکانیزم شکست ساختار اتمی تقویت گر کامپوزیت در کرنش ۰/۲۸ را نشان می دهد که در آن، با ادامهی بار کرنشی اعمالی، برهم کنش های اتمی ذرّات نانولوله نمی توانند بار را تحمل کرده و از هم گسیخته می شوند.

شکل (۳–۱۴)، مکانیزم تغییر شکل پلاستیک و شکست نمونههای خالص آلومینیم و نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولولهی نیترید بور بلند را نشان میدهد. شکل (۳–۱۴ الف) سمت چپ، پیکربندی تغییر شکل آلومینیم ، بعد از تسلیم شدن، در کرنش اعمالی ۰/۰۸ را نشان میدهد که در آن، اتمهای آلومینیم دچار پدیدهی نابجایی شده و در راستای صفحهی تنش برشی حداکثر میلغزند. شکلهای (۳–۱۴ ب و ج) سمت چپ، ادامهی تغییر شکل پلاستیک مادهی آلومینیم از طریق مکانیزم نابجایی و لغزش به ترتیب برای کرنشهای ۲/۲ و ۲/۰ را نشان میدهند. روی سطح آزاد نمونه، پلههای سطحی مشاهده میشود.

شکل (۳–۱۴ الف) مکانیزم تسلیم شدن نانوکامپوزیت نانولوله ی نیترید بور – آلومینیم در کرنش ۰/۰۸ را نشان می دهد که در آن، ماتریس از طریق نابجایی و لغزش و نانولوله نیز از طریق کمانش در راستای صفحات تنش برشی حداکثر تغییر شکل می دهند. ادامه ی تغییر شکل های پلاستیک نانوکامپوزیت در کرنش های فشاری اعمالی ۲/۲ و ۲/۳ به ترتیب در شکل های (۳–۱۴ ب و ج) نشان داده شدهاند. مکانیزم تغییر شکل پلاستیک تقویت گر از طریق کمانش در کرنش محوری اعمال شده ۲/۳ در شکل (۳–۱۴ د) نشان داده شده است. هیچ گونه شکستی در پیوندهای کوالانسی بین اتم های آن مشاهده نمی شود.



شکل (۳–۱۴) مکانیزم تغییر شکل ماتریس خالص (سمت چپ) و نانوکامپوزیت نانولولهی نیترید بور بلند-آلومینیم (سمت راست) در بارگذاری فشاری در کرنشهای (الف) ۸/۰۰= x_3 ، (ب) ۲/۰= x_3 و (ج) ۳/۰= x_3 ، (د) مکانیزم شکست نانولولهی نیترید بور در درون ماتریس در کرنش محوری ۳/۰= x_3 و (ه) مکانیزم تغییر شکل نانولولهی نیترید بور تنها (بدون ماتریس) در کرنش محوری ۳/۰= x_3 . در این شکل، عناصر آلومینیم، نیتروژن و بور به ترتیب با رنگ-های سبز، آبی و زرد نمایش داده شدهاند.

به منظور مقایسه تغییر شکل نانولولهی تقویت گر کامپوزیت با نانولولهی تنها، نمونهای از ساختار نانولوله-ی نیترید بور با مشخصات ساختاری و هندسی یکسانی مدلسازی شده و تحت بار کرنش فشاری مشابه با حالت کامپوزیت در راستای محور نانولوله قرار داده میشود. شکل (۳–۱۴ ه) پیکربندی نانولوله در کرنش اعمالی ۳/۰ را نشان میدهد که در آن، نانولوله از طریق کمانش، تغییر شکل پلاستیک میدهد. تفاوت زیادی در مد تغییر شکل تقویت گر در شکل (۳–۱۴ د) در مقایسه با نمونهی نانولولهی تنها مشاهده میشود. این موضوع، تأثیر میدان نیروی اطراف تقویت گر ناشی از برهم کنش اتمهای ماتریس در مکانیزم تغییر شکل آن را نشان میدهد.

۳–۳–۸– نتیجه گیری

در این بخش، تأثیر نانولولهی نیترید بور در رفتار مکانیکی آلومینیم تک-بلور با استفاده از روش شبیه-سازی دینامیک مولکولی بررسی گردید. دو حالت مختلف بلند و کوتاه برای تقویت گر و همچنین دو شرایط مرزی مختلف مورد مطالعه قرار گرفت. سپس تأثیر کسر اتمی و همچنین قطر نانولوله در خواص مکانیکی کامپوزیت مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج به دست آمده، تأثیر زیاد نانولولهی نیترید بور بلند در سفتی و استحکام کششی ماتریس آلومینیم را نشان میدهد که با نتایج تجربی مننتشر شده برای نانوکامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانولولهی نیترید بور سازگار است. ولی تأثیر شرایط مرزی در خواص نانوکامپوزیت ناچیز بود.

نتایج بررسی کسر اتمی نانولولهی بلند، تأثیر زیاد آن در خواص مکانیکی کامپوزیت را نشان می دهد به طوری که برای کسرهای اتمی ٪۸/۶، ٪۸۴/۵ و ٪۲۹/۲ او ٪۲۹/۲، استحکام نانوکامپوزیت به ترتیب به میزان ٪۲۹/۴، ٪۲۴/۲ و ٪۴۵۰/۲ و مدول یانگ هم به ترتیب به میزان ٪۸۲، ٪۱۴۱ و ٪۲۷۱ نسبت به ماتریس تقویت نشده در آزمایش کشش افزایش یافتند. در بارگذاری فشاری، مدول الاستیک نانوکامپوزیت برای کسرهای اتمی ٪۸/۶، ٪۸۱/۶ و ٪۲۹/۲ به ترتیب به میزان ٪۸۵ میزان ٪۲۵ و در بررسی تأثیر قطر نانولوله، در بارگذاری کششی تغییر قطر نانولوله تأثیر زیادی در خواص مکانیکی نانوکامپوزیت ایجاد نمی کند. ولی در بارگذاری فشاری، با افزایش قطر نانولوله از Å ۱۲/۷۹ به ۸ ۲۵/۵۸، مقدار استحکام به میزان ٪۲۶ کاهش یافت. مدول الاستیک نیز به اندازهی ٪۱۰/۵ کاهش پیدا کرد.

۳-۴- تحلیل رفتار مکانیکی نانوکامپوزیتهای لایهای فلز-گرافن

۳-۴-۳- مقدمه

کامپوزیتهای نانولایهای فلز-گرافن^۱ که از لایههای یک در میان فلز و گرافن تشکیل میشوند اخیراً به عنوان مواد کامپوزیتی جدیدی معرفی شدهاند که با بهرهگیری از استحکام و سفتی بالا، محدودهی الاستیک بزرگ و مساحت سطح بزرگ گرافن، دارای خواص مکانیکی بهبود یافتهی قابل توجهی هستند. تاکنون تحقیقات نسبتاً محدودی در بررسی رفتار مکانیکی این دسته از مواد کامپوزیت صورت گرفته است و هنوز زمینههای باز زیادی جهت مطالعه و بررسی رفتار آنها وجود دارند. به عنوان مثال، کیم^۲ و همکارانش کامپوزیتهای نانولایهای مس- و نیکل-گرافن با لایههای یک در میان گرافن و فلز را تولید کردند [۶۵]. آنها همچنین آزمایش فشار را بر نانوپیلر^۳ مبتنی بر نانوکامپوزیت لایهای مس- و نیکل-گرافن انجام دادند که توانایی گرافن در متوقف کردن انتشار نابجایی در سطح مشترک^۴ فلز-گرافن را نشان دادند. لیو⁴ و همکارانش اثرات استحکام بخشی گرافن در کامپوزیتهای نانولایهای فلز (مس و نیکل)-گرافن تحت بارگذاری ضربه با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی را مطالعه نمودند [۱۰۱]. آنها نشان دادند که سطح مشترک گرافن استحکام ضربهای کامپوزیت را بهبود می بخشد. لغزش⁴ و نیکل)-گرافن تحت بارگذاری ضربه با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی را مطالعه نمودند [۱۰۱].

⁵ Liu

¹ Metal-graphene nanolayered composites

² Kim

³ Nanopillar

⁴ Interface

⁶ Slip

⁷ Deformation twinning

هر دو مقیاس بالک و نانو به حساب میآیند [۱۰۲–۱۰۶]. هدف تحقیقی که در این بخش انجام می شود مطالعه ی مکانیزم تغییر شکل الاستیک-پلاستیک کامپوزیت های نانولایه ای فلز-گرافن تحت بارگذاری فشاری با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی می باشد. نمونه های مختلفی از ساختار نانولایه-ای با لایه های یک در میان گرافن و فلزات مس (Cu)، نقره (Ag)، طلا (Au)، نیکل (Ni) یا آلومینیم (Al) با ضخامت های مختلف ساخته می شوند.

۳-۴-۲- تابع پتانسیل و مدلسازی نمونه

تابع پتانسیل EAM در معادلات (۲–۱) و (۲–۲) برای توصیف برهم کنش بین اتمهای فلزی به کار گرفته میشود. پارامترهای پتانسیل برای پنج فلز مس، آلومینیم، نیکل، نقره و طلا از مراجع [۱۰۷– ۱۱۱] گرفته میشوند. از تابع پتانسیل ترساف^۱ در معادلات (۲–۳) تا (۲–۹) برای توصیف پیوندهای کوالانسی بین اتمهای کربن گرافن استفاده میشوند که مقادیر پارامترهای آن از مرجع [۱۱۲] گرفته میشود. برای تعریف برهم کنش بین لایههای فلز و گرافن از تابع پتانسیل ۲۱–۶ لنارد–جونز در معادلهی میشود. برای تعریف برهم کنش بین لایههای فلز و گرافن از تابع پتانسیل ۲۱–۶ لنارد–جونز در معادلهی ار-۱۰) استفاده میشود. برای تعیین دو پارامتر این تابع پتانسیل، از مقادیر منتشر شده برای عناصر یکسان در مراجع [۱۱۹–۱۱۲] استفاده میشود و با استفاده از قاعدهی ترکیب لورنتز–برتلوت (که در بخش ۴–۲–۲ با جزئیات بیشتری توضیح داده میشود) مقدار آنها برای جفت اتم فلز–کربن به دست میآید. انرژی کل سیستم نیز به عنوان مجموع سه تابع پتانسیل مذبور تعریف میشود. مقادیر به دست آمده برای پارامترهای پتانسیل لنارد–جونز برای فصل مشترک فلزات مختلف با گرافن به شرح زیر

$$\begin{split} \varepsilon_{C-Cu} &= 0.04675 \, eV \quad , \quad \sigma_{C-Cu} &= 2.8336 \, \text{\AA} \\ \varepsilon_{C-Ni} &= 0.052686 \, eV \quad , \quad \sigma_{C-Ni} &= 2.804745 \, \text{\AA} \\ \varepsilon_{C-Al} &= 0.0461554 \, eV \quad , \quad \sigma_{C-Al} &= 2.97183 \, \text{\AA} \\ \varepsilon_{C-Ag} &= 0.038083 \, eV \quad , \quad \sigma_{C-Ag} &= 3.0038 \, \text{\AA} \\ \varepsilon_{C-Au} &= 0.043185 \, eV \quad , \quad \sigma_{C-Au} &= 3.00335 \, \text{\AA} \end{split}$$

¹ Tersoff potential

شکل (۳–۱۵ الف) نمودار شماتیک نمونههای فلز خالص با جهتهای بلوری [$1\overline{0}$]، $[\overline{2}11]$ و [111] به ترتیب در جهت محورهای *X*. *Y* و *Z* را نشان میدهد. دلیل انتخاب جهت بلوری [111] در راستای محور *Z* این است که نمونههای شبیهسازی با نانوکامپوزیتهای ساخته شده در مراجع [6، [107] مطابقت داشته باشند. شکل (۳–۱۵ ب) مدل کامپوزیت متشکل از چهار لایهی فلزی به ضخامت (107) مطابقت داشته باشند. شکل (۳–۱۵ ب) مدل کامپوزیت متشکل از چهار لایهی فلزی به ضخامت *p* با همان جهتهای بلوری شکل (۳–۱۵ الف) و سه لایهی گرافن را نشان میدهد. به منظور بررسی تأثیر محتمل ضخامت کامپوزیت، پنج نمونه با ضخامتهای مختلف *q* برای هر دو سیستم فلز خالص و کامپوزیت به نامهای II الله II و V مطابق جدول (7-3) ساخته میشوند. شرایط مرزی در راستاهای *X* و *Y* تناوبی، ولی در راستای *Z* آزاد قرار داده میشوند. گام زمانی انتگرال گیری معادلات حرکت برابر Ifs ا فرض میشود. هر نمونه قبل از بارگذاری آن، برای IS به ۱۰۰ در دمای H می و فشار صفر تحت آنسامبل NPT جهت رسیدن به تعادل اجرا می گردد. سپس بار فشاری با نرخ کرنش مهندسی $^{1-1}$

جدول (۳-۶) ضخامت پنج نمونه یفلزی و کامپوزیت لایه ای (p) و همچنین ضخامت هر لایه یفلزی (q).

V	IV	III	II	Ι	نمونه
به ضخامت یک اتم	۴/۲	۱۲/۵	۲۰/۸	T9/T	q (Å)
۱۹/۱	۳۵/۸	۶٩/١	1.7/4	۱۳۵/۸	p (Å)

۳-۴-۳ نتایج شبیهسازی و تشریح آن

شکل (۳–۱۵ ج) نمودارهای تنش-کرنش نانوکامپوزیت لایهای مس-گرافن III، جفت مسی آن II2 (با همان ضخامت II1) و لایهی فلزی منفرد (به ضخامت *q*) را نشان میدهد. همان طور که در شکل (۳– ۱۵ ج) مشاهده می شود، لایه های گرافن کاهش زیادی را در استحکام فشاری کامپوزیت ایجاد می کند. دلیل این امر این است که سه لایهی گرافن، فلز را به چهار لایه با ضخامت چهار برابر نازکتر تقسیم می کنند که هر کدام استحکام فشاری کمتری نسبت به نمونهی II2 دارند. علاوه بر این، سطوح مشترک بین لایه های گرافن و فلز به دلیل ماهیت غیرپیوندی آن امکان لغزش آن ها را در هنگام اعمال بار فشاری افزایش میدهد. همچنین لایه های گرافن به عنوان ماده ای دو بعدی، استحکام فشاری بالایی مانند حالت

کششی ندارند [۱۱۸].

z ↑

 $(11\overline{2})$

(الف)

(111)

(110) p

XK







شکل (۳–۱۵ د) نمودارهای تنش-کرنش مهندسی نمونهی نانولایهای مس-گرافن (III) در طول فرآیندهای بارگذاری و معکوس آن در کرنشهای مختلف را نشان میدهد. همانطور که در این شکل مشهود است، کامپوزیت نانولایه به وضع اولیّهی خود، به جزء حالت $1/7 = x^3$ ، به طور کامل برمی گردد. بنابراین، اضافه نمودن گرافن، اثرات شبهالاستیک^۱ و حافظهی شکل^۲ قوی در نانوکامپوزیت ایجاد می-نماید. شکلهای الحاقی، مکانیزم تغییر شکل نانوکامپوزیت متناظر با نقطهی P1 را نمایان میسازد که

¹ Pseudoelasticity

² Shape memory

فرآیند تسلیم با تشکیل نابجایی موضعی شاکلی^۱ در لایههای فلزی بالا و پایین شروع می شود که با رسیدن به لایههای گرافن متوقف می گردد.

به منظور آشکار سازی مکانیزم متناظر با اثرات شبهالاستیک و حافظهی شکل در نمونهی نانوکامپوزیت، پیکربندی اتمی در طول تغییر شکل برای نمونههای III، III و III بررسی و مقایسه می گردد. شکل (۳–۱۶ الف) پیکربندی اولیّهی نمونهی مسی (II2) و مکانیزم تغییر شکل در کرنش می گردد. شکل (۳–۱۶ الف) پیکربندی اولیّهی نمونهی مسی (II2) و مکانیزم تغییر شکل در کرنش می گردد. شکل (۳–۱۶ الف) پیکربندی اولیّهی نمونه مسی (II2) و مکانیزم تغییر شکل در کرنش می گردد. شکل (۳–۱۶ الف) پیکربندی اولیّهی نمونه مسی (II2) و مکانیزم تغییر شکل در کرنش می دهد. $x_{17} = x_{23}$ از نمای جانبی در وسط نمونه را براساس تحلیل همسایهی مشترک^۲ (CNA) نشان می دهد. همان طور که در این شکل دیده می شود، نمونه از طریق لغزش سطحی به طور پلاستیک تغییر شکل می دهد که پلههای سطحی زیادی ایجاد می کند. لغزش از طریق حرکت نابجایی کامل <110]. چون که می دهد که پلههای سطحی زیادی ایجاد می کند. لغزش از طریق حرکت نابجایی کامل <110]. چون که می دهد که پلههای سطحی زیادی ایجاد می کند. لغزش از طریق حرکت نابجایی کامل <110]. چون که می دهد که پلههای سطحی زیادی ایجاد می کند. نگر از حریق حرکت نابجایی کامل <110]. چون که می داناق می افتد که در آزمایش فشار فلزات تک-بلور FCC به وفور دیده می شود [۲۰۱۹]. چون که می کنند. این فرآیند تغییر شکل، برگشت پذیر نیست. شکل (۳–۱۶ ب) پیکربندی اولیّه ی و مکانیزم می کنیزم می در این می دهد. در اینجا هم لغزش سطحی از طریق تشکیل و انتشار نابجایی، مکانیزم غالب در پلاستیستهی ماده می باشد.

شکل (۳–۱۶ ج) پیکربندی اولیّه و مکانیزم تغییر شکل پلاستیک کامپوزیت نانولایهای مس-گرافن (III) در کرنشهای مختلف را نشان میدهد. با این که تغییر شکل پلاستیک با تشکیل نابجایی در لایههای فلزی بالایی و پایینی مشابه با مس خالص اتفاق میافتد، لیکن این تغییر شکلهای موضعی توسط لایههای گرافن متوقف میشوند و از انتشار آنها در بقیهی ماده جلوگیری میکنند. با افزایش بار اعمالی، نابجاییهای موضعی شاکلی به دلیل مانع مؤثر لایههای گرافن نمیتوانند در ماده منتشر شوند. لایههای گرافن به شدت تغییر شکل میدهند، اما به دلیل پیوندهای کوالانسی محکمشان در ماده نفوذ نمیکنند. این امر را میتوان به دو ویژگی ذاتی گرافن نسبت داد: یکی، سفتی خمشی ضعیف آن، و

¹ Shockley partial dislocations

² Common neighbour analysis

دیگری، پیوندهای کوالانسی درون صفحهای مستحکم آن. شکل (۳–۱۶ د) ساختار تغییر شکل یافتهی لایههای گرافن در نمونهی III در کرنش -7 x_x را نشان می دهد که در آن، هیچ پیوند شکسته شدهای دیده نمی شود. در نمونهی کامپوزیت با افزایش کرنش فشاری اعمال شده، تغییر شکل دوقلویی شدهای دیده نمی شود. در نمونهی کامپوزیت با افزایش کرنش فشاری اعمال شده، تغییر شکل دوقلویی از طریق پلههای سطحی مانند نمونهی مس خالص رخ نمی دهد، ساختار آن تا قبل از این که دچار کمانش گردد، بازگشتیذیر است.



شکل (۳–۱۶) ساختارهای اولیّه و تغییر شکل یافتهی (بر اساس CNA) (الف) نمونهی مس II2 در کرنش ۰/۰۸، (ب) لایهی فلزی منفرد II3 (ج) کامپوزیت نانولایهای مس-گرافن III در کرنشهای مختلف، (د) لایههای گرافن تغییر شکل یافته در کرنش ۲/۲ و (ه) ساختار نهایی نمونهی III با برگرداندن کرنشهای فشاری اعمال شدهی ۰/۰۵، ۰/۱، ۰/۱۵ و ۲/۲ به ترتیب از چپ به راست.

تصاویر شکل (۳–۱۶ ه) پیکربندی نمونهی کامپوزیت را بعد از حذف کرنشهای فشاری اعمال شده در شکل (۳–۱۶ ج) را نشان میدهند. برای کرنش $\mathcal{E}_{\chi} = -1/6$ ، کامپوزیت در طول فرآیند باربرداری به

طور کامل به ساختار اولیّهی خود برمیگردد، که در آن مرزهای دوقلویی ٔ شکل گرفته در بارگذاری فشاری به تدریج از طریق زوجبرشیها ۲ به سمت همدیگر حرکت میکنند [۱۲۱، ۱۲۲]. نهایتاً وقتی که دو مرز جفتی همسایه به همدیگر میرسند، جداشدگی دوقلوها (detwinning) حاصل می شود. نکتهی دیگر این که تنش مورد نیاز برای جداشدن دوقلوها (detwinning) در طول فرآیند باربرداری به طور قابل ملاحظهای از تنش لازم برای تشکیل نابجایی و تغییر شکل دوقلویی (deformation twinning) در فرایند بارگذاری (شکل (۳–۱۵ د)) کمتر است. برای $\varepsilon_x = \cdot/1$ هم ساختار کامپوزیت به حالت اولیّهی خود برمی گردد، جز این که تعدادی اتمهای جابجاشده بر روی سطح آزاد مشاهده می شود. برای ماده. ای ماده به جا می ماند. ایکن، ماده $\varepsilon_x = \cdot/1$ برای کرنش بزرگ $\mathcal{E}_x = \epsilon_x$ به طور کامل به ساختار اولیّه برنمی گردد؛ چون که با حذف بار اعمالی تعدادی چینه (stacking fault) (حاصل از توده شدن ذرّات) در ماده به جا می ماند. این موضوع کمانش ماده در زیر بار کرنش اعمال شده $\mathcal{E}_{x} = \cdot/7$ را نشان می دهد. نتیجه این که اضافه نمودن لایه های گرافن به نمونهی مسی، قابلیت دوقلویی شدن (twinnability) و میزان رشد جفت^۳ در لایههای فلزی را افزایش میدهد. لایههای گرافن مادهی کامپوزیت را تبدیل به مادهای شبهالاستیک میکند که پس از حذف بار اعمالی می تواند تا کرنش فشاری ۱۵٪ - شکل اولیّهی خود را بازیابد.

جدول (۳–۷) مدول یانگ فشاری $E_x = E_y$ ، نسبت پواسون $v_{xy} = v_{yx}$ فلز خالص و نمونههای نانولایهای I تا V را برای ماتریس مس نشان میدهد. از محدودهی الاستیک و تئوری الاستیسیتهی خطی برای محاسبهی این خواص مکانیکی استفاده گردید. گرافن مدول الاستیک را افزایش میدهد، اما نسبت پواسون را در مقایسه با نمونهی خالص کاهش میدهد. علاوه بر این، مدول یانگ با افزایش کسر وزنی گرافن از نمونهی I به V به طور قابل ملاحظهای افزایش مییابد.

¹ Twin boundaries

² Shear coupling

³ Twin

0,		, , , , ,		0 0)	<i>"</i> "	• • •
نمونه		Ι	II	III	IV	V
(CD_{α}) E	فلزی خالص	188	١٨٣	۱۸۵	186	۱۸۵
$(GPa) E_x$	نانولايەاي	101	222	311	301	817
	فلزی خالص	۰/۳۹	٠/۴٧	٠/۴٨	•/۴۵	•/۴٩
v_{xy}	نانولايەاي	• /٣٣	•/44	•/77	۰ /٣	•/1٢

جدول (۳–۷) مدول الاستیک فشاری و نسبت پواسون برای نمونههای مس خالص و کامپوزیت نانولایهای.

همان طور که در شکل (۳–۱۷ الف) دیده می شود، بر خلاف نمونه های فلزی خالص، ناحیه ی الاستیک نمودارها در نانو کامپوزیت هموار می باشد. در حالی که نمودارهای تنش-کرنش دندانه دار در فلز خالص، تشکیل نابجایی و فرار از سطح آزاد را نشان می دهد. نمودارهای تنش-کرنش نانو کامپوزیت ها، تغییر ایجاد شده در مکانیزم تغییر شکل، یعنی تغییر شکل دوقلویی (deformation twinning) و کمانش، را ایجاد شده در مکانیزم تغییر شکل، یعنی تغییر شکل دوقلویی (deformation twinning) و کمانش، را نمایان می سازد. شکل (۳–۱۷) ساختار تغییر شکل یابجایی یافته می نانو کامپوزیت ها، تغییر نمایان می دوقلویی (deformation twinning) و کمانش، را ایجاد شده در مکانیزم تغییر شکل، یعنی تغییر شکل یوقلویی (deformation twinning) و کمانش، را و V در کرنش (۲۰ – ۲۷) ساختار تغییر شکل پلاستیک یافته می نمونه های کامپوزیت II، III، VI ایجاد شده در مانیزم تغییر شکل دوقلویی (و V در کرنش ا/۰ – x_3 تحت بارگذاری فشاری را نشان می دهد. همان طور که مشاهده می شود، نمونه می نسبتاً ضخیم I نیز مشابه با نمونه یا II به طور پلاستیک از طریق مکانیزم تغییر شکل دوقلویی (deformation twinning) تغییر شکل می دهد. لیکن، نمونه های ناز کار ای می داور که مشاهده می شود، از طریق کانیزم تغییر شکل می دهد. این می دوله می ناز کار ای این می دهد که برای (deformation twinning) تغییر شکل می دهد. ایکن، نمونه های ناز کار ای مانیزم تغییر شکل دوقلویی (و کار ماز مازی در این می دهد. این می دوله یا در این می دوله که برای در ای در این مازی در انشان می دهد که برای داز طریق کمانش تغییر شکل می دهند. این موضوع، وجود ضخامتی بحرانی را نشان می دهد که برای

ضخامتهای کمتر از آن، تغییر در مکانیزم تغییر شکل از تغییر شکل دوقلویی (deformation twinning) به کمانش اتفاق می افتد.



شکل (۳–۱۷) (الف) نمودارهای تنش-کرنش نمونههای نانولایهی گرافن-مس I تا V تحت بارگذاری فشاری و (ب) ساختار تغییر شکل یافتهی نمونههای نانولایهی گرافن-مس II، III ، V و V در کرنش ۰/۱ = \mathcal{E}_x براساس تحلیل

.CNA

شکل (۳–۱۸) ساختار تغییر شکل یافتهی نمونهی کامپوزیت II برای فلزات Au ،Ag و Ni ما می اسم Au و Ni مشابه با کرنش فشاری $1 - x_x = -1$ را نشان می دهد. برای ماتریس های Ag و Au مکانیزم تغییر شکل مشابه با ماتریس Cu مشاهده می گردد که در آن مواد کامپوزیت با تشکیل و انتشار تغییر شکل دوقلویی (deformation twinning) تغییر شکل پلاستیک می دهند. ولی مکانیزم تغییر شکل مادهی کامپوزیت برای ماتریس های Al و Ni متفاوت است که در آن ها، لغزش ناشی از نابجایی، مکانیزم غالب تغییر شکل می باشد. این اختلاف را می توان به میزان متفاوت تمایل دوقلویی شدن (twinning) فلزات FCC نسبت داد که با ثوابت الاستیک، انرژی چینه حاصل از توده شده ماده (stacking fault)، انرژی چینهی (stacking fault) ناپایدار و انرژی چینه حاصل از دوقلویی شدن (twinning fault) ناپایدار ارزیابی (stacking fault) بیشتری از عناصر Au و Ni و Ni می گردد. Ag و Au ، Ag و Na میزان قابلیت دوقلویی شده (twinnability) بیشتری از عناصر Al و Ni تحت یک بار اعمال شده دارند [۱۲۴، ۱۲۴]. اضافه نمودن گرافن تمایل دوقلویی شدن (twinning light) آنها را افزایش می دهد و باعث می شود که مواد کامپوزیت آنها از طریق مکانیزم تغییر شکل دوقلویی افزایش (twinning trup) تغییر شکل دهند. علاوه بر این، لایههای گرافن باعث می شوند که با معکوس کردن بار اعمالی، ساختار تغییر شکل یافته یانوکامپوزیتها، پیکربندی اولیّهی خود را بیابند.



شکل (۳–۱۸) مکانیزم تغییر شکل پلاستیک نمونهی نانوکامپوزیت III برای مواد مختلف ماتریس در کرنش فشاری ۱۰۰٪:

۳-۴-۴- نتیجه گیری

در این بخش از پژوهش رساله، تأثیر اضافه نمودن لایههای گرافن در رفتار مکانیکی کامپوزیت نانولایهای فلز-گرافن برای پنج عنصر فلزی FCC با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. تأثیر ضخامت لایهی فلزی در مکانیزم تغییر شکل کامپوزیتها مطالعه گردید. نتایج شبیه-سازی سه نقش مؤثر لایههای گرافن در خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای لایهای را آشکار میسازند. اول این که، آنها سفتی فشاری مواد کامپوزیت را افزایش میدهند. به عنوان مثال، با افزودن گرافن در نمونهی I با بیشترین ضخامت لایهی فلزی، مدول الاستیک به اندازهی ٪۴۹ افزایش مییابد. دوم این که، لایههای گرافن، استحکام فشاری آنها را کاهش میدهند. لیکن، با افزایش ضخامت لایهی فلزی، استحکام نانوکامپوزیتها به سمت استحکام مادهی فلزی خالص میل میکند. سوم این که، فصل مشترک بین ماتریس فلز و گرافن توانست به طور مؤثری از رشد و انتشار نابجایی ذرات فلزی جلوگیری نماید، علی رغم این که گرافن تنها به اندازهی یک اتم ضخامت دارد. نتیجه این که، موادی مهندسی با اثرات شبهالاستیک و حافظهی شکل (shape memory) ناشی از مکانیزم تغییر شکل دوقلویی (twinning (twinning) برای کامپوزیتها با پایهی Cu و A و A به دست آمدند.

فصل چهارم

تحلیل رفتار و خواص مکانیکی نانوکامپوزیت شیشههای فلزی تقویت شده

۴–۱– مقدمه

شیشههای فلزی گروه جدیدی از مواد هستند که به دلیل ساختار بینظم و غیر بلوری که دارند، دارای خواص فیزیکی و مکانیکی جالب و خارقالعادهای بوده که آنها را از فلزات بلوری متناظرشان متمایز ساخته است. آنها دارای استحکام بالا، سختی بالا، محدودهی الاستیک بزرگ، جذب انرژی پایین، مقاوم در برابر خوردگی و سایش و غیره (به عنوان مثال، سختی ویکر ۹۰۰، استحکام شکست MPa و محدودهی الاستیک بزرگ ٪۲ [۱۲۵]) میباشند. شیشههای فلزی در واقع ترکیبی از هر دو خواص فلزات و شیشهها هستند. بنابراین میتوانند دارای کاربردهای مهندسی متنوعی مانند تجهیزات نوری، صنعت ساعت سازی، سپرهای امواج الکترومغناطیسی، تجهیزات ورزشی، حسگرهای فشار، مواد پوششی، تجهیزات پزشکی و غیره باشند [۱۲۵]. یکی از ویژگیهای اصلی شیشههای فلزی این است که موادی ترد بوده و تحت بار اعمال شده به طور ناگهانی و بدون تغییر شکل پلاستیک در مقیاس ماکرو میشکنند. یکی از روشهایی است که مورد استفاده قرار می گیرد. بدین منظور، در این فصل، تأثیر افزودن نانولولهی کربنی بر خواص مکانیکی شیشههای فلزی و مکانیزم تغییر شکل آنها با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی بررسی می گردد. سپس برای تقویت و بهبود خواص مکانیکی مخصوصاً نرمی و چقرمگی شیشه-های فلزی، افزودن گرافن به آنها به عنوان تقویت گر پیشنهاد می گردد و با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی تأثیر گرافن بر رفتار مکانیکی و پلاستیسیتهی شیشههای فلزی بررسی می شود.

۲-۴- تحلیل رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی-شیشهی فلزی

۴–۲–۱– مقدمه

نانولولههای کربنی به دلیل استحکام و مدول یانگ بالایی که دارند به عنوان تقویت گر در انواع مختلف مواد به طور وسیعی به کار گرفته شدهاند. بیشترین استفادهی نانولولههای کربنی در پلیمرها بوده است. تلاشهای تجربی و محاسباتی زیادی برای تحلیل خواص مکانیکی پلیمرهای تقویت شده با نانولولههای کربنی صورت گرفته است [۲۲۹–۱۲۹]. به عنوان مثال، فرانکلند^۱ و همکارانش [۲۲۷] تغییر شکل کربنی صورت گرفته است [۲۲۹–۱۲۹]. به عنوان مثال، فرانکلند^۱ و همکارانش [۲۷۷] تغییر شکل کربنی صورت گرفته است [۲۲۹–۱۲۹]. به عنوان مثال، فرانکلند^۱ و همکارانش [۲۷۷] تغییر شکل کربنی صورت گرفته است [۲۲۹–۱۲۹]. به عنوان مثال، فرانکلند^۱ و همکارانش [۲۷۷] تغییر شکل مولکولی را بررسی کردند. نتایج آنها نشان میدهد که نانولولههای کربنی بلند، سختی پلیمر را به طور چشم گیری افزایش میدهند، در حالی که نانولولههای کربنی کوتاه، ماتریس را تقویت نمی کنند. فلزات گروه دیگری از مواد هستند که از نانولولههای کربنی برای بهبود خواص مکانیکی آنها استفاده گروه دیگری از مواد هستند که از نانولولههای کربنی برای بهبود خواص مکانیکی آنها استفاده شده است که کامپوزیتهای ماتریس فلزی^۲ نامیده میشوند و تاکنون تلاشهای زیادی برای مطالعهی آنها استفاده آنها صورت گرفته است [۲۰۰۱]. داوش^۳ و همکارانش [۱۳۳] خواص مکانیکی آنها استفاده شده است که کامپوزیتهای ماتریس فلزی^۲ نامیده میشوند و تاکنون تلاشهای زیادی برای مطالعه کربنی کامپوزیتهای نانولولهای کربنی-موس با کسرهای حجمی مختلف از نانولوله را مطالعه کردند. نتایج آنها حاکی از بهبود

¹ Frankland

² Metal matrix composites (MMCs)

³ Daoush

مدول الاستیک و سختی ماتریس مسی میباشد. در تحقیق دیگری، با ترکیب نانولولهی کربنی با ماترس مس، سختی و استحکام آن بهبود یافت [۱۳۴].

در سالهای اخیر، شیشههای فلزی بالک^۱ (*BMGs*) با ساختار اتمی بینظم به دلیل خواص مکانیکی، شیمیایی و فیزیکی متمایزشان توجه زیادی را به خود جلب کردهاند. آنها مقاومت خوردگی بالا، مدول الاستیک و استحکام بالا، سختی بالا و محدودهی الاستیک بزرگ دارند [۱۳۵]. تغییر شکل مکانیکی در شیشههای فلزی بالک آمورف^۲ خیلی متفاوت از آلیاژهای فلزی بلوری هستند و عیوب معمولی ساختارهای بلوری مانند نابجاییها و مرزهای دانهای را ندارند. بنابراین، آنها دستهی جدیدی از مواد ساختاری و عملکردی را تشکیل میدهند که کاربردهای زیادی مانند تجهیزات ورزشی، کالاهای لوکس، الکترونیک، و تجهیزات پزشکی خواهند داشت [۱۳۵].

شیشههای فلزی بالک محدوده ی الاستیک بزرگی دارند، اما وقتی که در معرض بارگذاری قرار می گیرند، جذب انرژی آنها پایین است. از این رو، تلاشهای زیادی برای افزایش توانایی جذب انرژی و بنابراین بهبود خواص نرمی^۳ آنها صورت گرفته است [۵، ۴۹، ۵۱، ۱۳۶–۱۳۸]. به عنوان مثال، سگریست^۴ و لوفلر^۵ [۱۳۷] ذرّات گرافیت را با ماتریس شیشهای ۲۶2.5Cu17.9A110Ni14.6Tis به منظور بهبود کرنش پلاستیک فشاری ماده ترکیب کردند. آنها نشان دادند که ناحیه ی پلاستیک آلیاژ با افزودن میکروذرّات گرافیت افزایش می یابد، ولی استحکام تسلیم آن مقداری کاهش می یابد. وو⁹ و همکارانش [۱۳۸] تأثیر تقویت گر 28 در خواص مکانیکی شیشههای فلزی بالک را بررسی نمودند. نتایج آنها نشان می دهد که ظرفیت تغییر شکل پلاستیک کششی کامپوزیت شیشه ی فلزی -28 بهبود می یابد.

- ³ Ductility characteristics
- ⁴ Siegrist
- ⁵ Löffler
- ⁶ Wu

¹ Bulk Metallic Glasses (BMGs)

² Amorphous

نانولولههای کربنی تقویت گرهای مناسبی برای بهبود هر چه بیشتر خواص الاستیک و پلاستیک مواد شیشهای هستند، به طوری که در مکانیزم تغییر شکل آنها، یعنی تشکیل و انتشار باندهای برشی تأثیر میگذارند. استحکام فشاری و کرنش پلاستیک آلیاژ آمورف بر پایهی منیزیم با افزودن نانولولهی کربنی بهبود یافته و باندهای برشی و ترکهای شکست را تحت تأثیر قرار میدهد [۴۹]. سو و همکارانش [۶] افزایش چشم گیری را در سختی و استحکام شکست کامپوزیت آمورف بر پایهی تیتانیم با افزودن ۱۲٪ نانولولهی کربنی به دست آوردند. نتایج آنها افزایش قابل ملاحظهای در محدودهی الاستیک با افزایش کسر حجمی نانولوله را نشان میدهد. باین ۲ و همکارانش [۱۳۹] شیشهی فلزی برپایهی زیرکونیم تقویت شده با نانولولهی کربنی را ساختند. نتایج آنها افزایش چشمگیری را در مدول الاستیک و سختی نشان میدهند. با این که این تحقیقات تجربی نقش مؤثر نانولولهی کربنی در بهبود خواص مکانیکی شیشههای فلزی را آشکار میسازند لیکن بررسی مکانیزم برهم کنش نانولوله-شیشهی فلزی در طول بارگذاری مکانیکی ماده حائز اهمیّت است. همچنین مطالعهی تأثیر نانولولههای کربنی در مکانیزم تسلیم و تغییر شکل شیشههای فلزی در مقیاس اتمی دارای اهمیّت ویژهای است که عامل محرک انجام تحقیق حاضر با استفاده ار شبیهسازی دینامیک مولکولی میباشد. نتایج این تحقیق را می توان در طراحی نانوکامپوزیتهای جدید بر پایهی شیشههای فلزی، با استحکام و نرمی بهبود یافته به طور همزمان، به کار گرفت.

۲-۲-۴ پتانسیلهای برهم کنش و نمونههای آزمایش

برای یک ماتریس فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی، سه نوع برهم کنش اتمی وجود دارد: (۱) برهم کنش بین عناصر فلزی ماتریس، (۲) برهم کنش بین اتمهای کربن تقویت گر (نانولوله) و (۳) برهم-کنش بین ماتریس فلزی و اتمهای تقویت گر. در تحقیق حاضر، از پتانسیل EAM در معادلات (۲–۱) و (۲–۲) برای بیان انرژی پیوندی بین اتمهای مس (Cu) و زیرکونیوم (Zr) در ماتریس استفاده می شود.

¹ Hsu

² Bian

از مقادیر پتانسیل به دست آمده توسط شنگ^۱ و همکارانش [۱۴۰] برای محاسبه برهم کنش اتمهای فلزی استفاده میشود. برای تعریف پتانسیل برهم کنش بین اتمهای کربن در نانولولههای کربنی، تابع انرژی ترساف از معادلات (۲–۳) تا (۲–۹) به کار گرفته میشود. از این تابع پتانسیل به طور وسیعی برای توصیف میدان پتانسیل بین اتمهای کربن نانولولهها توسط سایر محققین استفاده شده است [۱۲۱، برای توصیف میدان پتانسیل بین اتمهای کربن نانولولهها توسط سایر محققین استفاده شده است [۱۲۱ برای توصیف میدان پتانسیل بین اتمهای کربن نانولولهها توسط سایر محققین استفاده شده است [۱۲۱ برای توصیف میدان پتانسیل بین اتمهای کربن نانولوله وا توسط سایر محققین استفاده شده است [۱۲۱ برای توصیف میدان پتانسیل بین این تابع پتانسیل از مرجع [۱۱۲] گرفته میشوند. به منظور سنجش اعتبار این پتانسیل برای مدل نانولوله استفاده شده در مطالعهی حاضر، نانولولهای ساخته شد و در معرض بار کششی تک-محوری قرار گرفت. مقادیر GPa و ۹۷۶ GPA به ترتیب برای مدول یانگ و استحکام کششی به دست آمد که با مقادیر منتشر شده توسط سایر محققین در توافق است (به عنوان مثال [۱۴۵]).

فصل مشترک بین نانولوله و ماتریس دارای اهمیّت ویژهای است و استحکام کامپوزیت را تحت تأثیر قرار می دهد. تنش اعمال شده به ماتریس از طریق این فصل مشترک به تقویت گر انتقال می یابد. در مطالعات تجربی، روش های مختلفی برای بهبود پیوندهای اتمی در فصل مشترک ماتریس -نانولوله توسعه داده شدهاند [۵۹۱، ۱۹۶]. در موارد شبیه سازی، تابع پتانسیل لنارد – جونز برای توصیف برهم کنش واندروالس بین نانولوله و ماتریس فلزی به کار گرفته شده است [۷، ۹۰، ۱۹۲، ۱۴۶]. تحقیقات زیادی هستند که در آن ها از این تابع پتانسیل برای مدل نمودن فصل مشترک ماتریس و تقویت گر استفاده شده است. به عنوان نمونه، چوی و همکارانش [۱۴۷] برای تعریف فصل مشترک غیرپیوندی نانولوله پتانسیل لنارد – جونز ۲۱–۶ برای توصیف برهم کنش واندروالس ۲۰۰۰ در کامپوزیت چند لایه گرافن-پتانسیل لنارد – جونز ۲۱–۶ برای توصیف برهم کنش واندروالس ۲۰۰۲ در کامپوزیت چند لایه گرافن-پتانسیل لنارد – جونز ۲۱–۶ برای توصیف برهم کنش واندروالس ۲۰۰۲ در کامپوزیت چند لایه گرافن-

¹ Sheng

² Density functional theory

گونه پیوندی بین کربن و نیکل اتفاق نمی افتد. پتانسیل لنارد-جونز ۱۲-۶ توانسته است به خوبی برهم-کنش های واندروالس فصل مشترک بین این دو عنصر را توصیف نماید. در تحقیق حاضر نیز انرژی پتانسیل لنارد-جونز ۱۲-۶ مطابق معادلهی (۲-۱۰) برای مدل سازی فصل مشترک کربن با اتمهای مس و زیر کونیوم به کار گرفته می شود. لذا، در مدل های ساخته شده، هیچ گونه پیوندی شیمیایی بین اتمهای تقویت گر و ماتریس در طول شبیه سازی ها اتفاق نمی افتد. به طور کلی، از روش مشابهی برای تعریف برهم کنش های غیرپیوندی فصل مشترک در کلیه ینانو کامپوزیت های ساخته شده می گروش حاضر استفاده می گردد. در واقع، به کار گیری پتانسیل لنارد-جونز برای برهم کنش های غیرپیوندی روشی پذیرفته شده در مجامع علمی مهندسی مواد بوده و نتایجی منطقی و فیزیکی به دست می دهند [۱۴۸].

دلیل استفاده از این تابع پتانسیل در بالا توضیح داده شد و چند نمونه از مراجعی که این تابع پتانسیل را به کار گرفتهاند ذکر گردید. در واقع، به کارگیری تابع پتانسیل لنارد-جونز برای برهم کنش-های غیرپیوندی بین اتمهای کربن نانولوله و اتمهای فلزی ماتریس، روشی پذیرفته شده توسعه محققان میباشد. با توجه به اهداف تعریف شده در پروپزال رساله، بررسی خواص و کارآیی فصل مشترک تقویت-گرها و ماتریس جزو اهداف پژوهش حاضر نبوده و مورد بررسی قرار نمی گیرد. لیکن، برای توصیف آن از روشی استفاده می شود که توسط دیگران در شبیه سازی های دینامیک مولکولی تعریف شده و مورد تصیفاده قرار می گیرد. پارامترهای این تابع پتانسیل هم از مراجعی گرفته می شوند که برای آن عناصر تطبیق داده شدهاند.

پارامترهای σ و ع برای برهم کنشهای C-Cr و C-Zr براساس قاعدهی ترکیب لورنتز-برتلوت ا تعیین می گردد که به طور وسیعی برای تخمین پارامترهای لنارد-جونز برای اتمهای غیریکسان به کار برده می شود. برای مس، مقادیر $\sigma_{Cu-cu} = 7/79778$ و $\sigma_{Cu-cu} = \cdot/27078$ از مرجع [۱۴۹] گرفته می شوند. از مقادیر $\sigma_{Zr-Zr} = 7/9718$ و $\sigma_{Zr-Zr} = \cdot/278479$ برای اتمهای زیر کونیوم از مرجع [۱۵۰] استفاده می شوند. این مقادیر برای اتمهای کربن غیرپیوندی برابر $\sigma_{C-c} = \sigma_{C-c}$ و

¹ Lorentz-Berthlot mixing rule

و جور المیانگین هندسی ($\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} = \sqrt{\varepsilon_{11}\varepsilon_{22}}$) در المیانگین هندسی ($\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} = \sqrt{\varepsilon_{11}\varepsilon_{22}}$) در قاعده از میانگین هندسی ($\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} = \varepsilon_{c-c} = \varepsilon_{c-c} = \varepsilon_{c-c}$) و المیانگین هندسی ($\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} = \varepsilon_{c-c} = \varepsilon_{c-c} = \varepsilon_{c-c}$) و المی مناب المی می مذبور، مقادیر $\sigma_{c-cu} = -\frac{1}{2}$ و $\sigma_{c-cu} = \frac{1}{2}$ ($\sigma_{11} = \frac{1}{2}$) و $\sigma_{c-cu} = \frac{1}{2}$ ($\sigma_{11} = \frac{1}{2}$) و $\sigma_{c-cu} = \frac{1}{2}$) در قاعده مذبور به ترتیب برای فصل مشتر کهای C-Cu میانگین حسابی (2/2) ($\sigma_{12} = \frac{1}{2}$) در قاعده مذبور به ترتیب برای فصل مشتر کهای C-Cu و C-Cu میانگین حسابی (2/2) ($\sigma_{11} = \frac{1}{2}$) در قاعده مذبور به ترتیب برای فصل مشتر کهای C-Cu و C-Cu میانگین حسابی (2/2) ($\sigma_{12} = \frac{1}{2}$) در قاعده مدبور به ترتیب برای فصل مشتر کهای C-Cu و C-Cu و C-Cu میانگین حسابی (2/2) ($\sigma_{12} = \frac{1}{2}$) در قاعده مدبور به ترتیب برای فصل مشتر کهای C-Cu و C-Cu و C-Cu میانگین حسابی (2/2) ($\sigma_{11} = \frac{1}{2}$) در قاعده مدبور و تر می میانگین حسابی (2/2) (2/

انرژی پتانسیل *E_{total} ک*ل نانوکامپوزیت نانولوله-شیشهی فلزی با افزودن سه تابع پتانسیل فوقالذکر به دست میآید:

$$E_{\text{total}} = E_{\text{eam}} + E_{\text{Tersoff}} + E_{\text{LJ}}^{\text{C-Cu}} + E_{\text{LJ}}^{\text{C-Zr}}$$
 (۱-۴)
که در آن، E_{eam} انرژی پتانسیل اتمهای ماتریس، $E_{Tersoff}$ پتانسیل اتمهای کربن نانولوله، E_{LJ}^{c-cu} پتانسیل فصل مشترک بین ذرّات نانولوله و مس، و E_{LJ}^{c-Zr} پتانسیل بین اتمهای نانولوله و زیر کونیم را
نشان میدهند.

قبل از این که نمونههای آزمایش ساخته شوند، مدل آمورف نسبتاً بزرگی از آلیاژ Cu₆₄Zr₃₆ با گرم کردن و خنک کردن ساخته میشوند تا ساختار شکل گرفتهی خوبی از یک آلیاژ شیشهای به دست آید. برای این کار، نمونهای با ابعادی حدود ^A ۳۰۰×۳۰۰×۳۰۰ متشکل از ۱۶۸۸۴۸۷ اتمها مس و زیرکونیوم با شرایط مرزی تناوبی در هر سه راستا ساخته میشود. برای تعیین ساختار و موقعیّت اولیهی اتمها براساس ساختار بلوری fcc عنصر اصلی یعنی مس، با توجه به درصد اتمی اجزاء، تعداد اتمهای هر عنصر تشکیل دهنده (به ترتیب برای مس و زیرکونیم برابر ۱۰۸۰۶۳۲ و ۱۶۰۷۸۵ اتم) تعیین میگردد. با توجه به تعداد کل اتمها و هر کدام از عناصر، میتوان با استفاده از اعداد تصادفی، تمامی اتمها را در مکانهای شبکهی بلوری قرار داد. از آنجا که نمونه ذوب شده و برای مدتی در دمای بالای دمای ذوب نگه داشته میشود در نتیجه ساختاری بی نظم پیدا میکند؛ لذا ساختار اولیهی آن عملاً نانولوله، استوانهای با قطری برابر با مجموع قطر نانولوله و دو برابر ضخامت فصل مشترک ($\sqrt{2}\sigma_{ave}$) در وسط نمونههای آزمایش، توسط دستورات نرمافزار لمپس، برش داده میشود.

نمونهی اصلی از دمای اتاق تا دمای ۲۰۰۰ گرم میشود و سپس به مدت ۵۰۰ به تعادل میرسد. بعد از آن در سه مرحله با نرخهای متفاوت تا دمای ۲۰ خنک میشود. در مرحلهی میانی که مهم ترین مرحله میباشد، نمونه با کمترین نرخ خنکسازی ۲/۰۶۶۷ K/ps از دمای ۲۰۰ تا ۲ ۷۰۰ (که در آن، دمای انتقال شیشه قرار دارد [۱۵۲]) خنک میشود. برای مراحل اول و سوم از فرآیند خنکسازی به ترتیب از نرخهای ۵/۵ و ۲/۱۲ استفاده میشود. از این نمونهی اصلی خنک شده برای برش و ساخت نمونههای آزمایش استفاده میشود. شکل (۴–۱ الف) تابع توزیع جفت (معادلهی ۱۰۲۰) از فصل اول) شیشهی فلزی آماده شده را برای جفتهای اتمی Cu-Zr ، در الف اتمی ۲۰۰۲ نشان

نمودارهای شماتیک کامپوزیتهای نانولولهی کربنی-شیشهی فلزی، تقویت شده با نانولولهی کربنی بلند (پیوسته) و کوتاه (ناپیوسته) در شکل (۴–۱ ب) نشان داده شدهاند. بخشهای مشخص شده با مستطیلهای خطچین، مدلهای در نظر گرفته شده برای شبیهسازیهای دینامیک مولکولی را نشان میدهند. مدلهای سهبعدی شیشهی فلزی، نانولولهی کربنی بلند-شیشهی فلزی، نانولولهی کربنی کوتاه-شیشهی فلزی و نانولولهی کربنی به ترتیب در شکلهای (۴–۱ ج تا و) نمایش داده شدهاند. ابعاد این نمونههای آزمایش در راستاهای x، y و z به ترتیب برابر ^۳Å ۵۰×۵۰×۲۰/۲ هستند. کایرالتی نانولولهها، زیگزاگ (16,0) با قطر Å ۱۲/۵۴ و طولهای Å ۱۰۲/۳ و Å ۶۰/۶ به ترتیب برای مدلهای بلند و کوتاه میباشند.

- برای تعیین مدول یانگ E_{xx} نانوکامپوزیت در جهت موازی با محور نانولوله، شرایط مرزی تناوبی آزاد-آزاد به ترتیب در راستاهای x و z اتخاذ می گردد و نمونهها در جهت x با اعمال بار گذاری کششی آزاد-آزاد به ترتیب در راستاهای x و z اتخاذ می گردد و نمونهها در جهت x برا اعمال بار گذاری کششی آزاد-آزاد به ترتیب در راستاهای x و x اتخاذ می گردد و نمونه ما در جهت z با اعمال بار گذاری کششی آزاد-آزاد به ترتیب در راستاهای x و z اتخاذ می گردد و نمونه ما در جهت z با اعمال بار گذاری کششی آزاد-آزاد به ترتیب در راستاهای بار گذاری کششی آزاد-آزاد به ترتیب در راستاهای از مراح و از با محود و نمونه ما در جهت می آزاد-آزاد به ترتیب در راستاهای از مراح و از می مراح و نمونه ما در جهت z با اعمال بار گذاری کششی آزاد-آزاد به ترتیب در راستاهای از مراح و از می مراح و نمونه و از مراح و از مرح و از مراح و از مراح و از مرح و از مرح و از مراح و از مراح و ا



محاسبه میشود. کرنش ε_{xx} در هر گام زمانی از نرخ کرنش اعمالی محاسبه میگردد. در نتیجه، مدول یانگ از معادلهی الاستیک $E_{xx} = \sigma_{xx}/\varepsilon_{xx}$ برای تمامی نمونهها به دست میآید.

شکل (۴-۱) (الف) تابع توزیع جفت نمونهی اصلی *Cu64Zr36* بعد از خنک سازی، (ب) نمودار شماتیک شیشههای فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی بلند و کوتاه و (ج-و) به ترتیب پیکربندی اتمی شیشهی فلزی خالص، نانوکاموپوزیت تقویت شده با نانولولهی کربنی بلند و کوتاه، و نانولولهی کربنی زیگزاگ.

در تحقیق حاضر برای تعیین رفتار مکانیکی، نمودارهای تنش-کرنش و مدول یانگ نمونههای شیشهی فلزی و نانوکامپوزیتها، دو آزمایش مکانیکی کشش و فشار تک-محوری انجام میشوند. همچنین، برای بررسی رفتار مکانیکی مواد در جهت عرضی (عمود بر محور طولی تقویتگر) در معرض بارگذاری عرضی قرار می گیرند. در کل، دو شرایط مرزی مختلف تناوبی-تناوبی-آزاد و تناوبی-آزاد-آزاد اتّخاذ می گردد و گامهای زمانی ۱ و ۱۵/۵ فمتوثانیه (fs) به ترتیب برای شبیه سازی نمونه های شیشه و کامپوزیت استفاده می شوند. از آنسامبل هم دما-هم فشار TNT برای آماده سازی نمونه ی اصلی و به تعادل رساندن نمونه ها و از آنسامبل کانونی TNT برای انجام بارگذاری ها استفاده می شود. از نرمافزار شبیه-سازی لمپس [۱۰۰] برای انجام کلیهی شبیه سازی های دینامیک مولکولی استفاده می گردد. نرمافزار سازی لمپس [۱۰۰] برای انجام کلیهی شبیه سازی های دینامیک مولکولی استفاده می گردد. نرمافزار

۴-۲-۳ شیشهی فلزی خالص

 $m Å^r$ برای بررسی بیشتر شیشهای بودن ساختار نمونهی اصلی، مدل نسبتاً کوچکی از آن با ابعاد $m Å^r$ برای بررسی بیشتر شیشه و سپس در معرض بار (P P S) برش داده شده و سپس در معرض بار کششی تک-محوری در راستای محور x قرار می گیرد. اعمال شرط مرزی آزاد در راستای محور z اجازهی تغییر شکل و ابعاد را به نمونه می دهد که در شبیه سازی های دینامیک مولکولی شیشههای فلزی روشی رایچ می باشد [۱۵۴]. نمودار تنش-کرنش در شکل (۲-۲ الف) به وضوح نشان می دهد که سیستم، پدیده ی تسلیم را تخییر می بار می این معرف بار بای معرفی بار می تغییر شکل و ابعاد را به نمونه می دهد که در شبیه سازی های دینامیک مولکولی شیشههای فلزی روشی رایچ می باشد [۱۵۴]. نمودار تنش-کرنش در شکل (۲-۲ الف) به وضوح نشان می دهد که سیستم، پدیده ی تسلیم را تحت بار کششی اعمال شده تجربه می کند که در آن تنش به طرز چشم گیری کاهش می یابد. شکل الحاقی درون شکل (۲-۲ الف) مکانیزم تسلیم ماده را از طریق تشکیل یک باند برشی نشان می دهد که ویژگی غالب تغییر شکل پلاستیک در مواد شیشهای فلزی می باند.



شکل (۴-۲) (الف) نمودار تنش-کرنش و تشکیل باند برشی نمونه با ابعاد ^۹۳ ۸۵۰×۳۰×۳۰۰؛ رنگبندی شکل الحاقی، کرنش برشی اتمی موضعی تغییر شکل پلاستیک ماده را مینمایاند. و (ب) نمودار تنش-کرنش نمونهی شیشهی فلزی خالص برای دو نسبت ابعاد مختلف.

زی تناوبی-ازاد-ازاد.	ت ابعاد مختلف با شرایط مر	، شیشهی فلزی برای دو نسب	جدول (۴–۱) خواص مکانیکی
ε _y	$\sigma_{\rm y}~({ m GPa})$	E (GPa)	
•/•۶	۲/۵۵	۵۸/۴	a/b=١/۴
•/•۶	۲/۵۵	۵۹/۴	a/b=۲

به منظور صحت سنجی مدل ساخته شده و بررسی تأثیر احتمالی اندازهی نمونه، آزمایش کشش برای دو نسبت ابعاد مختلف a/b (a طول نمونه در راستای x و b عرض نمونه در راستای z) از نمونهی شیشه یفلزی با شرایط مرزی تناوبی-آزاد-آزاد انجام می شود. مطابق شکل (۴–۲ ب) رفتار مشابهی برای هر دو نمونه مشاهده می گردد. در این شکل نمادهای S و P به ترتیب نشان دهنده ی شرایط مرزی آزاد و تناوبی می با شند. جدول (۴–۱) مدول یانگ F، استحکام تسلیم σ_y و کرنش تسلیم E_y به دست آزاد و تناوبی می با نسبت ابعاد، تأثیری در خواص آمده برای هر دو نمونه با نسبت ابعاد مختلف را نشان می دهد. از آنجا که نسبت ابعاد، تأثیری در خواص مکانیکی ماده ایجاد نمی کند، کلیه ی شکا را نسبت ابعاد، تأثیری در خواص مکانیکی ماده ایجاد نمی کند، کلیه ی شبیه ها برای نسبت ابعاد ۲ انجام می گردد.

۴-۲-۴ بارگذاری کششی

شکل (۴–۳ الف) نمودارهای تنش-کرنش به دست آمده برای شیشهی فلزی خالص بارگذاری شده در راستای طولی (محور x) و همچنین کامپوزیت نانولولهی کربنی بلند-شیشهی فلزی با ۱۱٪ اتمی نانولوله برای دو شرایط مرزی مختلف را نشان می دهد. شکلهای الحاقی سمت راست پایین، سیستم مختصات و شرایط مرزی متناظر را نشان می دهد. شکل های الحاقی سمت راست پایین، سیستم مختصات و شرایط مرزی متناظر را نشان می دهند. شکل الحاقی سمت راست وسط، شماتیک مدل و نحوهی بارگذاری را نشان می دهد. شکل های الحاقی سمت راست پایین، سیستم مختصات و شرایط مرزی متناظر را نشان می دهند. شکل الحاقی سمت راست وسط، شماتیک مدل و نحوهی بارگذاری را نشان می دهد. همان طور که در شکل (۴–۳ الف) مشاهده می گردد، اضافه نمودن نانولوله ی کربنی بلند، خواص مکانیکی مادهی فلزی را به شدت تغییر می دهد. مدول الاستیک و استحکام کششی کامپوزیت تغییر زیادی می کنند. همچنین، توانایی ذخیرهی انرژی به عنوان مساحت زیر نمودار تنش- کربنی بلند، خواص مکانیکی مادهی فلزی را به شدت تغییر می دهد. مدول الاستیک و استحکام کششی کامپوزیت تغییر زیادی می کنند. همچنین، توانایی ذخیرهی انرژی به عنوان مساحت زیر نمودار تنش- کرنش به طور قابل ملاحظهای بهبود می یابد. لیکن تأثیر شرایط مرزی ناچیز است. مدول یانگ x_{xx} کرنش به طور قابل ملاحظهای بهبود می یابد. لیکن تأثیر شرایط مرزی ناچیز است. مدول یانگ می کرنش محاسبه شده در جهت محوری، استحکام تسلیم y و کرنش تسلیم y برای نمونههای خالص و محاسبه شده در جهت محوری، استحکام تسلیم y و کرنش تسلیم نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله کربنی کرنی بلند در مقایسه با نمونهی شیشهی فلزی خالص و نمونهی تقویت شده با نانولوله کربنی کوتاه، مشاهده می گرده، مدول الاستیک، تنش تسلیم و کرنش تسلیم نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله کربنی کربنی بلند در مقایسه با نمونه می ششه فلزی خالص و نمونهی تقویت شده با نانولوله کربنی کوتاه،


شکل (۴–۳) نمودار تنش–کرنش برای آزمایش کشش در راستای طولی برای (الف) نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی بلند-شیشهی فلزی، (ب) نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی کوتاه-شیشهی فلزی، و (ج) نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی بلند-شیشهی فلزی برای دو کسر اتمی مختلف از نانولولهی بلند. نمادهای *S* و *P* به ترتیب نشان دهندهی شرایط مرزی آزاد و تناوبی میباشند.

جدول (۴–۲) خواص مکانیکی نانوکامپوزیت شیشهی فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی کوتاه و بلند (۱۱٪ اتمی) تحت بار کششی تک-محوری برای شرایط مرزی تناوبی-آزاد-آزاد.

\mathcal{E}_y	σ_y (GPa)	E _{xx} (GPa)	
• • ۶	۲/۵۵	۵۹/۸	شیشهی فلزی
۰/۰۶۵	۲/۵۵	۶۷/۳	شیشهی فلزی-نانولولهی کربن کوتاه
۰/۱۹۵	٩/٨٢	١١٣	شیشهی فلزی-نانولولهی کربن بلند

نمودارهای تنش-کرنش برای نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی کوتاه-شیشهی فلزی در شکل (۴-۳ ب) برای دو شرایط مرزی مختلف نشان داده شدهاند. مشاهده می شود که نانولولهی کربنی کوتاه، کامپوزیت شیشهی فلزی را تقویت نمی کند. این امر ناکارایی انتقال بار فصل مشترک از ماتریس به نانولوله را آشکار می سازد. در حقیقت، ماتریس نمی تواند از خواص قوی تقویت گر استفاده نماید که می توان آن را به نسبت ابعاد خیلی پایین نانولوله (L/D = A) و ضعیف بودن برهم کنش بین نانولوله و ماتریس نسبت داد. علاوه بر این، فصل مشترک بین نانولوله و ذرّات فلزی با نیروهای غیرپیوندی واندروالس بیان شده است؛ در حالی که در نمونههای واقعی برهمکنش پیوند خوردهی بین نانولوله و فلزات در تحقیقات پیشین گزارش شده است [۱۵۵]. نوسانات دیده شده در محدودهی پلاستیک نمودارهای تنش-کرنش در شکل (۴–۳ ب) فرآیند تغییر شکل پلاستیک از طریق تشکیل و انتشار نابجاییها در درون ماتریس را نشان میدهند. با افزایش بار کرنشی اعمالی، اتمها در راستای تنش برشی حداکثر دچار لغزش شده (که به کاهش تنش میانجامد) و سپس در مقابل افزایش بار اعمالی مقاومت کرده (که باعث افزایش تنش میشود) و سپس دوباره دچار لغزش میگردند و این فرآیند تا گسیختگی کامل ماده ادامه می ابد. با مقایسهی دادههای جدول (۴–۲)، نتایج به دست آمده، بهبود ۱۲٪ مدول الاستیک نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولولهی کربنی کوتاه را نشان میدهند. این موضوع، شرکت کامل ماده ادامه می ابد. با مقایسهی دادههای جدول (۴–۲)، نتایج به دست آمده، بهبود ۲٪ مدول کرده (که باعث افزایش تنش میشود) و سپس دوباره دچار لغزش میگردند و این فرآیند تا گسیختگی کامل ماده ادامه می ابد. با مقایسهی دادههای جدول (۴–۲)، نتایج به دست آمده، بهبود ۲٪ مدول کامل ماده ادامه می ایند. بین می واند می می می در در زیم پلاستیک در تایج شید رای نانولولهی کربنی کوتاه را نشان می دهند. این موضوع، شرکت کامپوزیت برای نانولولهی کربنی کوتاه مشاهده نمیشود. علاوه بر این، لغزش بین ماتریس و تقویت گر در نتایج شبیه سازی دیده می شود که دلیل آن را می توان به اختلاف زیاد سفتی ماتریس و نانولوله نسبت داد.

شکل (۴–۳ ج) نمودارهای تنش-کرنش برای کامپوزیتهای نانولولهی کربنی-شیشهی فلزی برای کسرهای اتمی مختلف از نانولولهی کربنی بلند را نشان میدهد. همانطور که دیده میشود، با افزایش کسر نانولوله از ٪۵/۵ به ۱۱٪، خواص مکانیکی کامپوزیت بهبود مییابد. کسر نانولولهی کربنی را میتوان با افزایش سطح مقطع و در نتیجه تعداد اتمهای ماتریس کاهش داد، بدون این در ساختار نانولوله تغییری داده شود. برای کلیهی شبیهسازیهای بعدی شامل آزمایشهای کشش و فشار، کسر اتمی ۱۱٪

۴-۲-۵- بارگذاری کششی عرضی

برای بررسی رفتار تغییر شکل نمونهها در راستای عرضی عمود بر محور نانولولهی کربنی، نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی-شیشهی فلزی با اعمال کرنش کششی در راستای y بارگذاری می شود. شکل (۴-۴ الف) نمودارهای تنش-کرنش برای شیشهی فلزی خالص و نانوکامپوزیتهای تقویت شده با نانولولههای کربنی کوتاه و بلند با شرایط مرزی تناوبی-تناوبی-آزاد را نشان میدهد. همان طور که مشاهده می شود تقویت گر نمی تواند خواص مکانیکی ماتریس را در جهات عرضی بهبود ببخشد.

در نمونههایی که در جهت عرضی بارگذاری شدهاند، نانولوله هم در جهت عرضی تغییر شکل می دهد. همان طور که در شکل (۴–۴ ب) نشان داده شده است، نانولوله به همراه ماتریس در جهت بار اعمالی کشیده می شود. براساس نمودار تنش-کرنش و مکانیزم تغییر شکل نانولوله در کرنش ۲/۰ می توان نتیجه گرفت که نانولوله نمی تواند کرنش عرضی اعمالی را تحمل نماید و بنابراین نمی تواند کامپوزیت را در راستاهای عرضی تقویت نماید. این ویژگی تقویت گر باعث می شود که رفتار کامپوزیت به جهت وابسته بوده و در نتیجه ناهمسانگرد^۱ باشد. این موضوع، اهمیّت پخش یکنواخت نانولوله در ماتریس را برای داشتن کامپوزیتی همسانگرد در ابعاد ماکرو آشکار می سازد.



شکل (۴-۴) نمودارهای تنش-کرنش شیشههای فلزی خالص، نانوکامپوزیتهای نانولولهی کربنی بلند و کوتاه-شیشهی فلزی تحت کشش عرضی و (ب) تصاویر فصل مشترک نانوکامپوزیت نانولولهی کربنی بلند-شیشهی فلزی در دو

وضعيت بار گذاري مختلف.

شکلهای الحاقی بزرگ شده در شکل (۴–۴ ب) فصل مشترک بین ماتریس و نانولوله در یک وضعیت بدون بارگذاری و همچنین در کرنش اعمالی ۲/۲ = _{۷۷} را نشان میدهند. فصل مشترک توانسته است فاصلهی جدایی بین ماتریس و تقویت گر در طول فرآیند بارگذاری را حفظ نماید. این

¹ Anisotropic

موضوع نشان میدهد که فصل مشترک به خوبی نیروهای داخلی را انتقال داده و هیچ پیوندی بین عناصر نانولوله و فلزات مشاهده نمیشود.

۴-۲-۴ بارگذاری فشاری



شکل (۴–۵) نمودارهای تنش-کرنش شیشهی فلزی، نانوکامپوزیت شیشهی فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی بلند (الف) و کوتاه (ب) برای آزمایش فشار ساده.

	E _{vv} (GPa)	σ_{ν} (GPa)	$\mathcal{E}_{\mathcal{V}}$
شیشهی فلزی	۵۶/۶	١/۶٨	۰/۰۳۸
شیشهی فلزی-نانولولهی کربن کوتاه	۵۷/۴	١/۵	•/• ٣٢
شیشهی فلزی-نانولولهی کربن بلند	17.	۵/۲۵	•/• ۴٧

جدول (۴–۳) خواص مکانیکی شیشهی فلزی و نانوکامپوزیت شیشهی فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی کوتاه و بلند تحت بارگذاری فشاری ساده برای شرایط مرزی تناوبی-آزاد-آزاد.

۴–۲–۷ مکانیزمهای تغییر شکل

شکل (۴–۶) تصاویر لحظهای نمونههای بارگذاری شده در کرنشهای مختلف در راستای x برای آزمایش -های کشش (ستون سمت راست) و فشار (ستون سمت چپ) با شرایط مرزی تناوبی-تناوبی-آزاد را نشان میدهد. هر قسمت از این شکل، نماهای جلو و جانبی ماتریس و تقویت گر را در سمت چپ نشان میدهد و همچنین کرنش اتمی رنگی در میانهی نمونه قبل از پدیدهی تسلیم و بعد از تغییر شکل پلاستیک را در سمت راست نشان میدهد. این شکل همچنین مکانیزم تغییر شکل نانولوله را با جزئیات بیشتر نشان میدهد.

همان طور که در شکل (۴–۶ الف) نشان داده شده است، مدل شیشه فلزی خالص از طریق تشکیل باند برشی و گلویی روی سطح آزاد تسلیم شده و تغییر شکل می دهد که با شبیه سازی های دینامیک مولکولی پیشین در مورد نمونه های شیشه ی فلزی در مقیاس نانو سازگار است [۱۵۴، ۱۵۴]. علاوه بر این ها، مطالعاتی تجربی وقوع فرآیند گلویی در تغییر شکل پلاستیک فلزات آمورف نانومقیاس در آزمایش کشش تک-محوری را گزارش کرده اند [۱۵۸، ۱۵۸]. نمونه ی شیشه ی فلزی خالص مطابق شکل (۴–۶ کشش تک-محوری را گزارش کرده اند [۱۵۸، ۱۵۷]. نمونه ی شیشه ی فلزی خالص مطابق شکل (۴–۶ د) از طریق تشکیل باند برشی تحت بار فشاری اعمالی تسلیم شده و تغییر شکل پلاستیک می دهد. با مقایسه ی تصاویر شکل های (۴–۶ الف تا ج) دیده می شود کامپوزیت های نانولوله ی کربنی – شیشه ی فلزی تغییر شکل جانبی کمتری نسبت به شیشه ی فلزی خالص تجربه می کنند که سهم نانولوله در تحمل بار کششی و تغییر شکل پلاستیک را به وضوح آشکار می سازد. این نشان می دهد که بخش قابل توجهی از انرژی کرنشی اعمالی در پیونده ای کوالانسی کربن نانولوله جذب می گردد.



شکل (۴-۶) مکانیزمهای تغییر شکل شیشههای فلزی (الف و د)، نانوکامپوزیتهای تقویت شده با نانولولهی کربنی بلند (ب و ه) و نانوکامپوزیتهای تقویت شده با نانولولهی کربنی کوتاه (ج و و). تصاویر ستون راست و چپ به ترتیب برای آزمایشهای کشش و فشار هستند. تصویر سمت راست هر قسمت، کرنش اتمی داخل نمونه با طیف رنگی را نشان میدهد. تصاویر الحاقی بزرگ شده، تغییر شکل پلاستیک را با جزئیات بیشتر نشان میدهند. در این شکلها اتمهای کربن، مس و زیرکونیم به ترتیب با رنگهای آبی، زرد و قرمز نشان داده شدهاند.

پدیدهی تسلیم و در نتیجه تغییر شکل پلاستیک در آزمایش کشش با شکست پیوندهای اتمی نانولوله (شکل (۴–۶ ب)) و در آزمایش فشار با کمانش نانولوله (شکل (۴–۶ ه)) آغاز می گردد. شکلهای الحاقی شکل (۴–۶ ب) پیوندهای گسیختهی اتمهای نانولوله را نشان می سازد. شکل الحاقی شکل (۴– ۶ ه) کمانش نانولوله در نمای بزرگشدهی دیگری را نشان می دهد. نکتهی قابل توجه این که تغییر شکل کمانشی نانولوله در راستای باند برشی اتفاق می افتد و هیچ گونه گسیختگی در پیوندهای کربن نانولوله در طول پدیدهی کمانش مشاهده نمیشود. در آزمایش کشش همانطور که در شکل (۴-۶ ب) سمت راست دیده میشود، نانولوله مسیر شکل گیری باند برشی در مرکز نمونه را مسدود میسازد.

در مقابل، نانولولههای کوتاه در مکانیزم تغییر شکل پلاستیک کامپوزیت مشارکت نمی کند و مطابق شکلهای (۴–۶ ج و و) پدیدهی تسلیم در بخشهایی از ماتریس رخ میدهد که با نانولوله تقویت نشدهاند. مطابق شکل الحاقی نشان داده شده در شکل (۴–۶ و) مشاهده میشود که لبههای نانولوله پیوندهای فلزی ماتریس را تحت بار فشاری اعمالی میشکند و تعدادی از اتمهای فلز وارد نانولوله میشوند. به علاوه این که لغزش در فصل مشترک بین تقویت گر و ماتریس مخصوصاً در نواحی دو سر نانولوله مشاهده میشود.

۴-۲-۴ نتیجه گیری

در این بخش، تأثیر افزودن نانولوله در تغییر شکل مکانیکی و استحکام نانوکامپوزیت شیشههای فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. نکات زیر را میتوان از یافتههای این بخش استخراج نمود:

 (۱) نانولولههای بلند به طرز چشم گیری استحکام و سفتی شیشههای فلزی آمورف را بهبود میبخشند. نانلولهی بلند مدول الاستیک و استحکام کششی کامپوزیت را به ترتیب به میزان ۸۹٪ و ۸۵٪ افزایش داد؛ مقادیر فشاری این خواص را نیز به ترتیب میزان ۱۱۲٪
 و ۲۱۲٪ بهبود بخشید. نتایج نشان میدهند که نانولولههای بلند میتوانند مکانیزم تغییر شکل الاستیک-پلاستیک ماتریس شیشههای فلزی را تغییر دهند؛ چون که آنها میتوانند شکل الاستیک-پلاستیک ماتریس شیشههای فلزی را تغییر دهند؛ چون که آنها میتوانند به طور مستقیم در تحمل بارهای کششی و فشاری اعمالی مشارکت نمایند. در مقابل، نانولولههای کوتاه نمیتوانند ماتریس شیشهی فلزی را تقویت کنند. این را میتوان به دو دلیل اصلی زیر نسبت داد: (الف) برهم کنش غیرپیوندی بین ذرات ماتریس و تقویت گر و (ب) وجود بخشهای غیرتقویت شده در درون ماتریس که در مقابل بارهای کرنشی خارجی، مقاومت خیلی کمتری از خود نشان میدهند.

- (۲) افزودن نانولولهی کربنی به ماتریس شیشهی فلزی اختلاف قابل توجهی در خواص مکانیکی کامپوزیت ایجاد میکند. در حالی که نانولولههای کربنی بلند ماتریس را در جهت محوری خود تقویت میکنند، ولی به دلیل عدم توانایی تقویت گر لولهای در تحمل بارهای اعمالی عرضی، تأثیری تقویت کننده در جهات عرضی در کامپوزیت ایجاد نمیکنند. این نتیجه، اهمیّت پخش یکنواخت نانولوله در ماتریس را برای تولید کامپوزیتی همسانگرد در ابعاد ماکرو آشکار میسازد.
- (۳) ظرفیت ذخیره انرژی شیشههای فلزی با جذب انرژی کرنشی اعمالی توسط نانولولههای بلند بهبود مییابد که میتوان آن را در نمودارهای تنش-کرنش به دست آمده در شکل (۴–۳ الف) مشاهده کرد.
- (۴) براساس نتایج عددی به دست آمده، رفتارهای مکانیکی متفاوتی برای نانوکامپوزیت شیشه-ی فلزی تقویت شده با نانولولهی کربنی برای شرایط مختلف بار گذاری پیشبینی می گردد. استحکام کششی کامپوزیت با نانولولهی بلند تقریباً دو برابر حالت فشاری است. در آزمایش کشش، گسیختگی پیوندهای کربن نانولوله دلیل شکست تقویت گر می باشد؛ در حالی که در آزمایش فشار، کمانش نانولوله دلیل شکست ماده می باشد.

نتایج به دست آمده از نظر کیفی با مطالعات تجربی پیشین در نانوکامپوزیتهای تقویت شده با نانولولهی کربنی سازگار است و از آنها میتوان در طراحی و تولید نانوکامپوزیتهای نانولولهی کربنی-شیشهی فلزی بالک با استحکام و نرمی بالا بهره گرفت.

۴–۳– تحلیل رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت شیشهی فلزی–گرافن

۴–۳–۱– مقدمه

همان طور که در بخشهای پیشین ذکر گردید، به دلیل انتشار سریع باندهای برشی در درون ماده، شیشههای فلزی بالک به طور ناگهانی بدون تغییر شکل پلاستیک در مقیاس ماکرو شکسته می شوند [۲۴، ۱۵۹]. از این رو، در طول دههی گذشته تلاشهای زیادی برای تقویت و بهبود نرمی^۱ و چقرمگی^۲ شیشههای فلزی بالک صورت گرفته است [۶، ۳۲، ۱۳۶، ۱۶۰]. از آنجا که باندهای برشی نقش اصلی را در رفتار پلاستیک شیشههای فلزی بالک ایفا می کنند، پلاستیسیتهی آنها را میتوان با ایجاد عدم تجانس^۳ در درون ماده برای جلوگیری از انتشار باندهای برشی بهبود بخشید [۱۶۱] یا میتوان تشکیل آنها را غیر موضعی^۴ نمود [۲۳، ۱۶۲].

در این خصوص، معرفی فاز دوم به عنوان روشی معمول برای تقویت و بهبود نرمی یا چقرمگی مواد شیشهای به کار گرفته شده است [۱۳۶–۱۳۸، ۱۶۱–۱۶۹]. رایجترین روش استفاده شده، معرفی کامپوزیت میکروساختاری متشکل از ماتریس آمورف و ذرّات بلوری یا دندریت^۵ میباشد. فاز بلوری دوم میتواند به عنوان مکانهای تشکیل باندهای برشی و بنابراین افزایش تعداد باندهای برشی در سراسر میتواند به عنوان مکانهای تشکیل باندهای برشی و بنابراین افزایش تعداد باندهای برشی در سراسر میتواند به عنوان مکانهای تشکیل باندهای برشی و بنابراین افزایش تعداد باندهای برشی در سراسر فرآیند خنکسازی انجماد در مرجع [۱۶۷] منجر به افزایش قابل ملاحظهای در کرنش شکست و چقرمگی شیشههای فلزی Ispal در مرجع [۱۶۷] منجر به افزایش قابل ملاحظهای در کرنش شکست و چقرمگی شیشههای فلزی و چیزمگی ایندریت منعبی مرکزدار² (ISC) و ماتریس شیشهای به طرز چشم گیری افزایش دادند. نمونهی کششی ماکرومقیاس آنها به روشی نرم تغییر شکل پلاستیک داد به طوری که پدیدهی گلویی قابل ملاحظهای (با ۵۰٪ کاهش در سطح مقطع) در بخش سنجهی آن مشاهده گردید.

نانوکامپوزیتهای لایهای متشکل از لایههای یک در میان فلزات شیشهای و بلوری نیز به روشی دیگر برای بهبود عملکرد مکانیکی شیشههای فلزی بالک پیشنهاد شدهاند [۱۷۰-۱۷۲]. کیم^۷ و

- ⁴ Delocalize
- ⁵ Dendrite
- ⁶ Body-Centered Cubic (BCC)
- ⁷ Kim

¹ Ductility

² Toughness

³ Heterogeneity

همکارانش [۱۷۰] کامپوزیت نانولایهای شیشهی فلزی Cu50Zr50 و مس نانوبلور را ساختند که ۲۵٪ افزایش در استحکام شیشهی فلزی و حدود ۴٪ کرنش شکست برای آن به دست آمد که از شکست ناگهانی معمول شیشههای فلزی جلوگیری کرد.

در حالی که تمامی تقویت گرهای فوقالذکر به عنوان مکانهایی برای آغاز تشکیل چندین باند برشی (به عنوان مثال، افزودن ذرّات بلوری) یا به عنوان موانعی در سر راه انتشار باندهای برشی (به عنوان مثال، تشکیل کامپوزیت نانولایهای آمورف-بلور) عمل میکنند. استفاده از گرافنها به عنوان تقویتگر شیشههای فلزی برای بهبود نرمی و چقرمگی آنها پیشنهاد می گردد. به دلیل ساختار فوق العاده قوی درون صفحهای گرافنها از یک طرف و فصل مشترک غیرپیوندی ضعیف آنها با ماتریس از طرف دیگر، این قابلیت را دارند که نقش دوگانه ایفا کنند و به عنوان منابعی برای تشکیل باندهای برشی و موانعی در سر راه انتشار آنها عمل کنند. مطالعات قبلی تأثیر تقویتی نانومواد کربنی، مانند نانولولههای کربنی، بر روی استحکام شیشههای فلزی را نشان دادهاند [۶، ۴۹، ۱۳۹]، اما تأثیر آنها را بر روی نرمی و چقرمگی بررسی نکردهاند. سگریست و لوفلر ۲ [۱۳۷] ذرّات گرافیت را با ماتریس شیشه فلزی Zr52.5Cu17.9Al10Ni14.6Ti5 تركيب نمودند و دريافتند كه با تغيير اندازهى ذرّات گرافيت، كرنش پلاستیک ٪۱۸/۵ را میتوان به دست آورد، بدون این که استحکام ماده کاهش یابد. با این که هیچ مطالعهای تجربی در خصوص افزودن ورقهای گرافن به شیشههای فلزی گزارش نشده است، لیکن به عنوان یک مزیت خوب، گرافنها را میتوان برای ترکیبهای مختلف آلیاژهای آمورف به کار برد. علاوه بر این، در مقایسه با انواع دیگر عدم تجانس (ذرّات بلوری، نانوذرّات فاز دوم یا نانولولههای کربن)، گرافن به دلیل مساحت سطح بالای آن بهتر میتواند از تشکیل و انتشار باندهای برشی جلوگیری نماید.

بنابراین، در بخش حاضر، تأثیر گرافن در خواص مکانیکی مخصوصاً نرمی و چقرمگی شیشههای فلزی با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی بررسی میشود. بدین منظور، مدلهای مختلفی از

¹ Siegrist

² Löffler

شیشههای فلزی مبتنی بر Zr-Cu تقویت شده با گرافنهای پیوسته (بلند) و ناپیوسته (کوتاه) ساخته میشوند. سپس برای تعیین رفتار مکانیکی و مکانیزم تغییر شکل آنها در معرض بار کششی ساده قرار داده میشوند. آرایش و طولهای نسبی مختلف از گرافن برای تعیین تأثیر آنها در تغییر شکل الاستیک-پلاستیک نانوکامپوزیتهای ساخته شده بررسی میشوند. همچنین امید است که بتوان با نمونههای نانوکامپوزیت شیشهی فلزی-گرافن بتوان کارآیی تقویت گر در تشکیل چندین باند برشی و جلوگیری از انتشار آنها در بهبود نرمی و چقرمگی بررسی نمود.

۴-۳-۲ پتانسیلهای برهمکنش و نمونههای آزمایش

از پتانسیل EAM در معادلات (۲–۱) و (۲–۲) برای توصیف برهم کنش اتمی ذرّات ماتریس فلزی استفاده می شود. در اینجا هم مانند بخش ۴–۲، از مقادیر منتشر شده توسط شنگ^۱ و همکارانش [۱۴۰] برای محاسبه پتانسیل برهم کنش اتمها استفاده می گردد. پتانسیل ترساف نیز در معادلات (۲–۳) تا (۲–۹) برای بیان پیوندهای کوالانسی کربن در تقویت گر به کار گرفته می شوند. برای تعیین پارامترهای آن از نتایج مرجع [۱۱۲] استفاده می شود. برای ارزیابی اعتبار این تابع پتانسیل برای مدل سازی گرافن، یک ورق گرافن تک-لایه ساخته می شود و در معرض کشش درون صفحهای قرار می گیرد. نتایج مالا ۲۰۷۱، خوبی با نتایج منتشر شدهی قبلی سازگاراند (به عنوان مثال، [۱۲۳]).

در اینجا نیز از پتانسیل لنارد-جونز ۱۲-۶ در معادلهی (۲-۱۰) برای تعریف برهم کنش بین اتمهای کربن تقویت گر و اتمهای فلزی مس و زیرکونیوم ماتریس استفاده می گردد. از همان پارامترهای به دست کربن تقویت گر و اتمهای فلزی مس و زیرکونیوم ماتریس استفاده می گردد. از همان پارامترهای به دست مده در بخش ۴-۲-۲ برای تعیین پارامترهای تابع پتانسیل لنارد-جونز استفاده می شود، یعنی: $\varepsilon_{C-Cu} = 0.04675 \ eV$, $\varepsilon_{C-Zr} = 0.05569 \ eV$ $\sigma_{C-Cu} = 2.8336 \ A$, $\sigma_{C-Zr} = 3.1509 \ A$

و شعاع برش پتانسیل برابر $m A = r_c = 9$ فرض می گردد.

¹ Sheng

انرژی پتانسیل کل E_{total} نانوکامپوزیت شیشهی فلزی-گرافن با افزودن سه تابع پتانسیل فوقالذکر به صورت زیر محاسبه میشود:

$$E_{\text{total}} = E_{\text{eam}} + E_{\text{Tersoff}} + E_{\text{LJ}}^{\text{C-Cu}} + E_{\text{LJ}}^{\text{C-Zr}}$$
 (۲-۴)
که در آن، E_{eam} انرژی پتانسیل اتمهای ماتریس، $E_{Tersoff}$ پتانسیل اتمهای کربن نانولوله، E_{LJ}^{c-cu} پتانسیل فصل مشترک بین ذرّات گرافن و مس، و E_{LJ}^{c-Zr} پتانسیل بین اتمهای گرافن و زیرکونیم را
نشان میدهند.

آلیاژ آمورف Cu64Zr36 با ابعاد ۳۰۰×۳۰۰×۳۰۰ که قبلاً در بخش ۴-۲-۲ آماده شده بود، به عنوان مادهی پایه برای برش و ساخت ماتریس مدل نانوکامیوزیتها به کار گرفته می شود. شکل (۴–۷) نمودار شماتیک پیکربندیهای مختلف گرافن و ماتریس شیشهی فلزی مدلسازی شده را نشان میدهد. در مجموع ۱۰ مدل مختلف به نامهای نمونهی II ،I، ... و X در نظر گرفته می شوند که در تعداد، آرایش و طول تقویت گرها با هم فرق دارند. شکل (۴–۷) نمای جلو (صفحهی xz) و نمای بالای (صفحهی xy) هر نمونه را نشان میدهد که در آن a، b و c به ترتیب ضخامت، ارتفاع و پهنای نمونهها هستند. به طور کلی، دو اندازهی مختلف برای شیشههای فلزی خالص، یعنی نمونهی I در شکل (۴–۷)، در نظر گرفته می شوند. در حالت اول، $b = r \cdot \cdot \dot{A}$ ، $a = 1 \circ \cdot \dot{A}$ که نمونهی شیشهی فلزی خالص متناظر با مدلهای نانوکامپوزیت II، III، II و VI (به نام نمونههای کوتاه) هستند. در حالت دوم، و b=۹۰۰ Å و c=۳۰ که نمونهی شیشهی فلزی خالص متناظر با مدلهای b=۹۰۰ Å ،a=۱۵۰ Å نانو کامپوزیت IX، VIII، VII و X (به نام نمونههای بلند) هستند. شرایط مرزی همهی نمونهها به ترتیب در راستاهای x و z برابر آزاد-تناوبی-تناوبی قرار داده میشوند. شرط مرزی آزاد در راستای z یعنی ضخامت قطعه برای این است که نمونه با اعمال بار کششی اجازه تغییر شکل طبیعی و در نتیجه تشکیل باند برشی داشته باشد. آنسامبلهای همدما- همفشار NPT با فشار صفر و کاننی NVT به ترتیب برای فرآیندهای تعادل و بارگذاری استفاده میشوند که در آنها دمای سیستم در مقدار ثابت ۲۰ K قرار داده می شود. گام زمانی ۱ fs برای کلیهی شبیه سازی ها فرض می شود و هر نمونه به مدت ۱۰۰ ps رها

می شود تا قبل از بارگذاری به تعادل ترمودینامیکی برسد. نمونهها با اعمال بار کرنش کششی با نرخ کرنش ثابت ¹⁻ ۲۰^۸ در راستای *z* کشیده می شوند. از نرمافزار دینامیک مولکولی لمپس [۱۰۰] برای اجرای شبیه سازی ها استفاده می گردد. برای ترسیم پیکریندی و کرنش اتمی نمونه ها، نرمافزار OVITO به کار گرفته می شود.



شکل (۴–۷) نمودار شماتیک نمونههای آزمایش شیشهی فلزی و نانوکامپوزیت شیشهی فلزی-گرافن تقویت شده با گرافنهای بلند و کوتاه. نماهای جلو و بالای هر نمونه نشان داده شدهاند.

طولها و آرایشهای مختلفی برای گرافنها جهت تقویت ماتریس شیشهی فلزی در نظر گرفته میشوند. گرافنها از دیدگاه طول به دو دستهی متمایز تقسیم میشوند. در دستهی اول، گرافن پیوسته بوده و در راستای محور z طول نامحدودی دارد که نمونهی III میباشد که با شرط مرزی تناوبی تکرار میگردد. این حالت ایدهآلی است که در مدلسازی عددی نانوکامپوزیت فلز-گرافن میتوان در نظر گرفت. در دستهی دوم، گرافنها غیرپیوسته بوده و دارای طول کوتاهی هستند که در بقیهی نمونهها برای تقویت ماتریس از آنها استفاده میگردد. دستهی دوم به پخش گرافنها در نمونههای واقعی همان طور که در شکل (۴–۷) نشان داده شدهاند، نمونههای IV ، IV و VI کوتاه هستند که به ترتیب با یک، دو، سه و چهار گرافن کوتاه تقویت می شوند. نمونههای VIII، VIII و X بلند هستند که به ترتیب با هفت، ده، سه و چهار گرافن کوتاه تقویت می شوند.

۴-۳-۳- خواص فیزیکی و مکانیکی

جدول (۴–۳) کسر اتمی و وزنی گرافنها در هر نمونه و همچنین چگالی هر نمونه را نشان میدهد. چگالی با اضافه نمودن جرمهای اتمی هر سه عنصر (C, Cu, Zr) و تقسیم آن بر حجم به تعادل رسیدهی هر نمونه به دست میآید. همانطور که در جدول (۴–۴) مشاهده می شود، با افزایش کسر وزنی تقویتگر، چگالی نانوکامپوزیت کاهش مییابد. برای محاسبهی این خواص مکانیکی، فرض میشود که مواد کامپوزیت دارای خواص یکسانی در راستاهای y و z، یعنی $E = E_y = E_z$ و $Y = v_{vz} = v_{vz}$ ، می-باشند. به عبارت دیگر، مواد به طور عرضی همسان گرد با صفحهی تقارن عمود بر محور x فرض می شوند. این فرض منطقی است چون که همهی مواد در نظر گرفته شده در راستاهای y و z تناوبی هستند و خواص درون صفحهای گرافنها تقریباً یکسان هستند. به علاوه، کسر وزنی گرافنها در مقایسه با ماتریس خیلی کم است که به دلیل ساختار آمورف آن همسانگرد میباشد. شکل (۴–۸ الف) مدول یانگ (E_z) و نسبت پواسون (v_{yz}) به دست آمده برای نمونهها از I تا X را نشان میدهد. برای نمونهی V تنها نتایج حالت $heta = 97/4^\circ$ نشان داده شده است. شکل (heta - h ب) مدول الاستیک و نسبت یواسون را به عنوان تابعی از کسر وزنی تقویتگر نشان میدهد. با افزایش کسر وزنی گرافن، روندی افزایشی برای مدول یانگ نانوکامپوزیتها مشاهده میشود؛ در حالی که نسبت پواسون آنها کاهش مییابد. مشاهده میشود با این که کسر وزنی گرافن در نمونهی V (۱/۴ wt%) و نمونهی IX (%۱/۳۷ wt) مشابه هستند، نمونهی بلند (IX) مدول یانگ بالاتری از نمونهی کوتاه (V) دارد. روند مشابهی بین نمونهی VI (wtw) ۲/۱۶) و نمونهی X (%۲/۱۳ wt) دیده می شود که در آن نمونهی بلند (X) مدول یانگ بزرگتری از نمونهی کوتاه (VI) دارد. در توضیح این موضوع این که در نمونهی کوتاه (مانند نمونهی V) چگالی

جدول (۴–۴) کسرهای اتمی و وزنی گرافن و چگالی کلّیّهی نمونهها. نمادهای I(S) و I(L) نمونهی I به ترتیب در حالتهای کوتاه و بلند را نشان میدهند.

	I (S)	I (L)	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	Х
at.%	•/•	•/•	۲/۳۷	۴/۵۹	۶/۳۰	٧/٩٧	11/91	٧/٩٧	11/91	۷/۸۵	۱۱/۷۵
wt.%	•/•	•/•	٠/۴٠	•/٧٨	۱/• ٩	۱/۴۰	۲/1۶	۱/۴۰	۲/۱۶	١/٣٧	۲/۱۳
ρ (g/ cm ³)	٧/۶٩	٧/۶٨	٧/۶٠	٧/۵٠	٧/۴١	۷/۳۶	٧/٢١	۷/۳۶	٧/١٩	٧/١۴	٧/١۵

¹ Interface

² Size effect



شکل (۴–۸) مدول یانگ و نسبت پواسون تخمین زده شده در راستای محور z (الف) برای نمونههای شیشهی فلزی و نانوکامپوزیتهای I تا X و (ب) به عنوان تابعی از کسر وزنی اتمهای کربن گرافن. نمادهای I(S) و I(L) نمونهی I به ترتیب در حالتهای کوتاه و بلند را نشان میدهند.

۴-۳-۴ نتایج نمونههای کوتاه

شکل (۴-۹) نمودارهای تنش-کرنش و مکانیزم تغییر شکل برای نمونههای II ،I و III تحت بارگذاری کششی در راستای z را نشان میدهد. در این شکل، ساختار تغییر شکل یافته در یک طیف رنگی از کرنش اتمی نشان داده شدهاند. شکلهای الحاقی رسم شده در شکل (۴–۹ الف) محورهای مختصات به همراه شرایط مرزی متناظرشان و نمودار شماتیک پیکربندی نانوکامپوزیتها را نشان میدهند. همانطور که در شکل (۴–۹ الف) دیده میشود، گرافن کوتاه (با طول L =۱۵۳/۵ Å) نمیتواند نمونهی II را تقویت کند. در مقابل، گرافن بلند در نمونهی III ماتریس شیشهی فلزی را تقویت می کند و استحکام کششی و کرنش نهایی را به ترتیب به اندازهی ٪۶۷/۳ و ٪۱۹۵ افزایش میدهد و چقرمگی ماده را به اندازهی ٪۹۰ مطابق جدول (۴–۵) بهبود میبخشد. مقدار چگالی انرژی کرنش در کرنش شکست به عنوان چقرمگی (مدول چقرمگی) شناخته می شود . چقرمگی برابر با مساحت زیر نمودار تنش-کرنش میباشد و انرژی بر واحد حجم مورد نیاز برای شکست ماده را بیان میکند. شکل (۴–۹ ب) مکانیزم تغییر شکل در نمونهی I برای کرنشهای اعمالی ۰، ۱۰، ۲۰ و ۴۰٪ را نشان میدهد. تغییر شکل پلاستیک نمونه در نقطهی تسلیم از طریق تشکیل و رشد موضعی یک باند برشی آغاز می گردد. تشکیل باند برشی، مد تغییر شکل غالب در شیشههای فلزی میباشد [۱۷۴–۱۷۷] که در شبیهسازیهای دینامیک مولکولی مخصوصاً در دماهای پایین دیده شده است [۴۰، ۴۳، ۱۵۴، ۱۷۸–۱۸۱]. تغییر شکل پلاستیک ماده در یک باند برشی و ناحیهی گلویی متمرکز میشود. پدیدهی گلویی به تدریج و به طور وسیع قبل از شکست ماده مشابه با مواد بلوری رشد می کند، در کشیدگی نمونه مشارکت می کند و در نتیجه مطابق شکل (۴–۹ ب) منجر به ایجاد نرمی کششی ٪۴۰ در شیشه یفلزی می شود. این مشاهده ی دینامیک مولکولی ثابت می کند که شیشههای فلزی می توانند به طریقی نرم بدون شکست ناگهانی تغییر شکل دهند که با نتایج تجربی در مقیاس نانو منتشر شده توسط گیو^۱ و همکارانش [۱۵۷] در توافق است؛ که در آن، نرمی کششی بالای ۲۳٪ تا ۴۵٪ را برای نمونههای شیشه یفلزی کوچک گزارش کردهاند. علاوه بر این، نمودار تنش –کرنش، استحکام تسلیم، تشکیل باند برشی و پدیده ی گلویی در توافق خوب با نتایج گزارش شده توسط تیان و همکارانش [۱۵۸] برای شیشههای فلزی خالص Cu-Zr

همانطور که در شکل (۴–۹ ب) نشان داده شده است، صفحهی باند برشی در حدود ۵۰ درجه نسبت به محور بارگذاری تشکیل می گردد که از زاویهی صفحهی برشی حداکثر بزرگتر است. این رویداد در توافق با نتایج تجربی منتشر شده در مورد شیشههای فلزی هست. به عنوان نمونه، گائو و همکارانش [۱۸۲]، انحراف از زاویهی ایدهآل $\frac{\pi}{4}$ برای ترکیبهای مختلف آلیاژهای شیشهای تحت شرایط بارگذاری فشاری و کششی را گزارش کردند. مقادیر مختلفی برای زاویهی شکست یا باند برشی از ۴۹/۴ تا ۴۶ درجه برای بار فشاری و از ۴۸ تا ۶۰ درجه برای بار کششی متناسب با ترکیب شیشهای فلزی مشاهده کردهاند.

شکل (۴–۹ ج) رفتار تغییر شکل نمونهی II در کرنشهای مختلف را نشان میدهد که در آن باند برشی مشابه با نمونهی I رخ میدهد؛ چون که لایهی گرافن، صفحهی باند برشی را به بخشهای تقویت نشدهی ماتریس انتقال میدهد. ولی در نمونهی III مطابق شکل (۴–۹ د) کرنش اعمال شده در یک باند برشی متمرکز نمیشود، بلکه گرافن پیوسته باعث میشود بار خارجی اعمالی در سراسر ماده پخش گردد که منجر به پلاستیسیتهی بزرگی در آن میشود. نهایتاً با افزایش بار کششی، کامپوزیت در جایی شکسته می شود که ساختار گرافن، مطابق شکل الحاقی در شکل (۴–۹ د)، از هم می پاشد. نواحی قرمز رنگ در نمونه های تغییر شکل یافته تحت بار اعمالی، کشیده شدن ماتریس و لایه های گرافن را آشکار می سازد.



شکل (۴-۹) نمودارهای تنش-کرنش نمونههای *I، II و III* (الف)، مکانیزم تغییر شکل نمونهی *I* (ب)، نمونهی *II* (ج)، و نمونهی *III* (د) در کرنشهای اعمالی مختلف تحت بار کششی در راستای *z*.

جدول (۴–۵) چقرمگی (MJ/m³) نمونههای کوتاه II تا VI و درصد افزایش آن نسبت به نمونهی خالص I.

	Ι	II	III	IV	V	VI
چقرمگی	۵۲۰	۵۵۰	٩٩١	۵۸۲	۷۵۳	۷۷۶
درصد افزایش	• / •	Δ/Λ	۹ • /۶	۱۱/۹	۴۴/۸	49/2

نمودارهای تنش-کرنش به دست آمده برای نمونههای IV و V در شکل (۴–۱۰ الف) به همراه نمونهی I جهت مقایسه نشان داده شدهاند. مطابق شکل (۴–۱۰ د) با تغییر طول لایهی گرافن میتوان زاویهی heta را تغییر داد به طوری که با افزایش طول گرافن مقدار زاویه هم افزایش پیدا میکند. نتایج نشان میدهد که پیکربندی نمونههای IV و V با زاویهی ۴۵[°] = θ کامپوزیت را تقویت نمی کند؛ در حالی که پیکربندی نمونه V با زاویه ک[°] ۶۳/۴ = θ محدوده ی پلاستیک کامپوزیت را حدود ۲۵٪ و مطابق جدول (۴–۵) چقرمگی آن را حدود ۲۵٪ بهبود می بخشد. با توجه به شکل (۴–۱۰ ه)، گرافنها موانق مهم را در بهبود قابل توجه در نرمی و چقرمگی ماتریس نمونه V برای [°] ۶۳/۴ = θ ایفا می کنند: اول این که از تشکیل یک باند برشی غالب جلوگیری می کنند؛ و دوم این که تحت بار خارجی اعمالی، لبههای گرافنها تعداد مکان تمرکز کرنش و تغییر شکل پلاستیک کامپوزیت را افزایش می دهند. می کنند: اول این که از تشکیل یک باند برشی غالب جلوگیری می کنند؛ و دوم این که تحت بار خارجی اعمالی، لبههای گرافنها تعداد مکان تمرکز کرنش و تغییر شکل پلاستیک کامپوزیت را افزایش می دهند. می کنند: اول این که از تشکیل یک باند برشی غالب جلوگیری می کنند؛ و دوم این که تحت بار خارجی می کنند؛ اول این که از تشکیل یک باند برشی غالب جلوگیری می کنند؛ و دوم این که تحت بار خارجی می کنند؛ اول این که از تشکیل یک باند برشی غالب جلوگیری می کند؛ و دوم این که تحت بار خارجی می کنند؛ و می این که می می داند مکان تمرکز کرنش و تغییر شکل پلاستیک کامپوزیت را افزایش می دهند. به عبارت دیگر، فصل مشترک بین لایههای گرافن و ماتریس باعث می شود که بار کرنشی اعمالی در مکانهای مختلفی پخش گردد و از تمرکز آن در یک باند برشی تنها جلوگیری کند.



شکل (۴–۱۰) نمودارهای تنش–کرنش نمونههای *IV ا*و *V* (الف)، مکانیزم تغییر شکل و شکست نمونهی *IV* (ب)، و نمونهی *V* با زاویهی دهانهی $\theta = 40^\circ$ (ج) و $\theta = 97/4^\circ = \theta$ (ه) در کرنشهای مختلف تحت بار کششی در راستای *z*. (د) تعریف زاویهی دهانه θ بین دو تقویت *گ*ر مجاور.

برای نمونهی IV، که در آن طول لایههای گرافن برابر $L = 7 \cdot \cdot / 4$ است، با تکرار آن در راستای z دهانهی بین تقویت گرها را می توان تصور نمود که در آن باند برشی می تواند تشکیل شده و عبور کند z

که منجر به شکست ماده می شود، بدون این که حضور گرافنها تأثیری در آن داشته باشند. شکل (۴-که منجر به شکست ماده می شود، بدون این که حضور گرافنها تأثیری در آن داشته باشند. شکل (۴-۱۰ د) زاویهی دهانهی تشکیل شده بین لبههای دو لایهی مجاور را نشان می دهد که در آن q و p به ترتیب فاصلهی بین دو گرافن مجاور و طول قسمت مشترک آنها در راستای z را نشان می دهند. زاویه را می توان از رابطهی $\frac{2L-b}{2p} = \frac{q}{p} = 4$ به دست آورد که در آن L و h به ترتیب طول تقویت گر و ارتفاع نمونه مطابق شکل (۴-۲) هستند.

چون که در شکل (۴–۱۰ ج) زاویه برابر ⁶۵[°] = θ است، این آرایش تقویت گرها نمی تواند از رشد باند برشی در دهانه جلوگیری نماید. با افزایش زاویه به ⁶۶۳/۴ = θ که از جهت برشی شیشهی فلزی بیشتر است، بار کرنشی اعمالی در مکانهای موضعی بیشتری پخش می گردد و در نتیجه نرمی نانوکامپوزیت مطابق شکل (۴–۱۰ ه) بهبود می یابد. با وجود این، تحت بار کششی اعمالی، لغزش بین تقویت گر و ماتریس مشاهده می گردد. این نشان می دهد که برهم کنش تقویت گر–ماتریس نمی تواند تنش برشی منتقل شده را تحمل کند. همان طور که در شکل (۴–۱۰ ه) مشاهده می شود، گرافنها با کشیدن نمونه می لغزند که زاویهی دهانه θ را کاهش می دهد و در نتیجه مسیری آزاد از گرافن برای شکل گیری باند برشی ایجاد می گردد. این موضوع، نقش مهم فصل مشتر ک گرافن-ماتریس در تقویت شمکل گیری باند برشی ایجاد می گردد. این موضوع، نقش مهم فصل مشتر ک گرافن-ماتریس در تقویت رو، با قوی تر کردن فصل مشترک، نرمی شیشهی فلزی را می توان بیشتر تقویت نمود؛ به عنوان مثال با پیوند شیمیایی ذرات ماتریس با اتمهای گرافن در فرآیند تولید مواد واقعی می توان این کار را انجام داد [۹. ۲۰. ۲۲، ۲۶، ۲۸]

شکل (۴–۱۱) نمودارهای تنش-کرنش و کرنش اتمی برای نمونههای VI و I تحت بار کششی در راستای *z* را نشان میدهد. همان طور که در شکل (۴–۱۱ الف) دیده می شود، هر دو خواص الاستیک و پلاستیک نانو کامپوزیت شیشهی فلزی-گرافن با افزودن گرافن با آرایش نشان داده شده بهبود می یابد. به دلیل غیرمتمر کز نمودن پلاستیسیتهی ماده مطابق شکل (۴–۱۱ ب)، نرمی و چقرمگی نمونهی VI به ترتیب حدود ٪۲۵ و ٪۵۰ بهبود می یابد. حضور گرافن ها تعداد مکان های برشی را در نمونه، افزایش



شکل (۴–۱۱) (الف) نمودار تنش-کرنش نمونههای I و VI و (ب) مکانیزم تغییر شکل نمونهی VI در کرنشهای مختلف تحت بار کششی در راستای z.

میدهد و از تشکیل یک باند برشی تنها در عرض ماتریس ممانعت مینمایند. با کشیدن بیشتر نمونه، تقویت گرها در درون ماتریس میلغزند زاویهی دهانه heta کاهش مییابد. در نتیجه، باند برشی رشد کرده و سرانجام کامپوزیت را میشکند، بدون این که ساختار گرافن گسیخته شود. نکتهی قابل توجه این که به دلیل فصل مشترک ضعیف گرافن-ماتریس، قابلیت تقویت گری گرافن توسط ماتریس شیشهی فلزی به طور کامل به کار گرفته نمی شود.

در حالی که شکلهای (۴–۱۰) و (۴–۱۱) نشان میدهند که گرافن کوتاه میتواند نرمی و چقرمگی شیشههای فلزی را به طور قابل ملاحظهای بهبود بخشند، چنین بهبودی برای نانولولههای کربنی دیده نمی شود اگر چه نانولوله و گرافن خواص مشابه زیادی مانند استحکام تسلیم و مدول الاستیک بالا دارند. به دلیل هندسی لولهای شکل و مساحت سطح خیلی کوچکتر، نانولولههای نمیتوانند موانع مؤثری در سر راه رشد باندهای برشی مانند لایههای گرافن ایجاد نمایند؛ که این موضوع در واقع کلید بهبود نرمی و چقرمگی شیشههای فلزی در بارگذاری کششی میباشد. با این که در شبیهسازیهای دینامیک مولکولی از نرخ کرنش خیلی زیاد ^۸ ۱۰ نسبت به آزمایشهای تجربی استفاده شد، منتها رویکرد غیرمحلی کردن تغییر شکل پلاستیک در شیشههای فلزی تقویت شده با گرافن در تشکیل چندین باند برشی و محدود نمودن انتشار باندهای برشی در توافق با یافتههای تجربی قبلی در مورد کامپوزیتها با پایهی شیشهی فلزی با افزودن ذرآت فاز دوم (۱۳۶–۱۳۸، ۱۶۱–۱۶۹) یا با تشکیل نانولایههای کریستال آمورف (۱۷۰–۱۷۲) میباشد؛ اگرچه هنوز نتایج تجربی مستقیمی برای شیشههای فلزی تقویت شده با گرافن وجود ندارد.

۴–۳–۵– نتایج نمونههای بلند

به دلیل محدودیت محاسباتی و زمانی شبیه سازی دینامیک مولکولی، در مدل های قبلی به طول Å ۳۰۰ = *b* به منظور مدل سازی نمونه های واقعی با طول بلند، شرط مرزی تناوبی در راستای *z* به کار گرفته شد. با این که این تکنیک در شبیه سازی های دینامیک مولکولی به طور وسیع استفاده می گردد، اتخاذ طول تناوبی می تواند منجر به اثرات غیر طبیعی مربوط به اندازه در نتایج شبیه سازی شود. به منظور پیش بینی بهتر خواص مکانیکی مواد واقعی، نمونه ی بلند تر با طول سه برابر مدل سازی می شوند. شکل (۴–۱۲) نمودارهای تنش –کرنش و مکانیزم تغییر شکل برای نمونه ی شیشه ی فلزی I (Å نمونه های IIV و III تحت بار کرنش کششی در راستای *z* را نشان می دهد. این نمونه ها سه برابر نمونه های IIV و III تحت بار کرنش کششی در راستای *z* را نشان می دهد. این نمونه ها سه برابر افزودن گرافن نمی تواند استحکام تسلیم ماتریس را بهبود بخشد. دلیل آن این است که بار کرنشی افزودن گرافن نمی تواند استحکام تسلیم ماتریس را بهبود بخشد. دلیل آن این است که بار کرنشی افزودن گرافن نمی تواند استحکام در می شود. لیکن، در مقایسه با نمونه ی شیشه ی فلزی خالص، بهبود افرودن گرافن زمی توانه می می می می در می می در می می می می می می ای ای این است که بار کرنشی زور مالی در نواحی بین گرافنها متمرکز می شود. لیکن، در مقایسه با نمونه ی شیشه ی فلزی خالص، بهبود قابل ملاحظه ای بالای ٪۱۰۰ در محدوده ی پلاستیک و در نتیجه در نرمی و همچنین بالای ٪۱۵۰ در چقرمگی (مطابق جدول (۴–۴)) به دست می آید.

شکل (۴–۱۲ ب) مکانیزم تغییر شکل نمونهی I در کرنشهای اعمالی مختلف را نشان میدهد، که در آن، نمونه با تشکیل یک باند برشی تنها در عرض ماده تغییر شکل پلاستیک میدهد. شکل (۴–۱۲ ج) مکانیزم تغییر شکل نانوکامپوزیت VII در گامهای مختلف از بارگذاری را نشان میدهد. نمونه از هفت گرافن کوتاه در دو خط موازی به فاصلهی Å ۵۰ تشکیل شده است. چندین باند برشی کوچک بین گرافنها تشکیل میشود که توسط لایههای گرافن طرف مقابل مسدود می گردد. تقویت گرها مکان-های تمرکز تنش بیشتری را برای تغییر شکل پلاستیک کامپوزیت فراهم می نماید. آنها همچنین از رشد باندهای برشی موضعی شکل گرفته جلوگیری می کنند. لیکن، حرکت نسبی گرافنها زاویهی دهانه را کوچکتر ساخته و باند برشی بزرگی را ایجاد میکنند که در نهایت منجر به گسیختگی کامپوزیت میگردد.

مطابق شکل (۴–۱۲ د) مکانیزم تغییر شکل مشابهی برای نمونه VIII مشاهده می گردد که از ده گرافن کوتاه در سه خط موازی به فواصل Å ۳۷/۵ تشکیل شده است. تغییر شکلهای پلاستیک از سطوح آزاد ماتریس در نزدیکی انتهای گرافنها آغاز می گردد. تقویت گرهای میانی، آزادی باندهای برشی در عبور از عرض ماتریس محدود می کنند. نرمی این نمونه به دلیل پیکربندی متفاوت آن تا اندازهای بیشتر از نمونهی VII بهبود می یابد. سرانجام، کامپوزیت به دلیل لغزش صفحات فصل مشترک بین تقویت گرها و ماتریس شکسته می شود، بدون این که در ساختار گرافنها شکستکی مشاهده گردد. در اینجا نیز نتایج نشان می دهند که به دلیل طبیعت ضعیف برهم کنش فصل مشترک ماتریس -گرافن، قابلیت تقویت گری گرافنها توسط ماتریس به طور مؤثر به کار گرفته نشدهاند. البته در عمل با ایجاد [۱۸۴]

¹ Functionalization



شکل (۴-۱۲) نمودارهای تنش-کرنش نمونههای *I، VII* و VIII (الف)، مکانیزم تغییر شکل نمونهی *I* (ب)، نمونهی VII (ج) و نمونهی VIII در کرنشهای مختلف تحت بار کششی در راستای محور z.

در مواد واقعی با اندازههای خیلی بزرگتر (یا به طور دقیقتر با طول بزرگتر در جهت z) از شبیه-سازیهای دینامیک مولکولی، بهبود در نرمی و چقرمگی کامپوزیتهای شیشهی فلزی-گرافن نسبت به شیشهی فلزی خالص باید از آنچه در شکل (۴–۱۲) نشان داده شده است، بیشتر باشد. دلیل این امر این است که تغییر شکل در کامپوزیتهای شیشهی فلزی-گرافن کم و بیش همگن است و افزایش در طول تناوبی منجر به افزایش مکانهای محتمل برای تشکیل باند برشی می گردد که باعث می شود نرمی و چقرمگی در اندازههای بزرگتر تقریباً بدون تغییر باشند. در مقابل، چون که پلاستیسیتهی شیشهی فلزی خالص به یک باند برشی تنها با اندازهی مشابه صرفنظر از طول محدود است، وقتی که طول نمونه افزایش می یابد، نرمی باید به صورت درصد کشیدگی به طور قابل توجهی کاهش یابد. این موضوع را می توان با مقایسه نمودارهای تنش کرنش نشان داده شده در شکلهای (۴ – ۱۲) و (۴ – ۱۲) به خوبی مشاهده کرد.

جدول (۴–۴) چقرمگی (MJ/m³) نمونههای بلند VII تا X و درصد افزایش آن نسبت به نمونهی خالص I.

	Ι	VII	VIII	IX	Х
چقرمگی	74.	۶۰۳	۶۹۳	۳۱۸	4.4
درصد افزایش	• / •	101/3	$\Lambda A / A$	٣٢/۵	۶۸/۳

برای اثبات این که بهبود فوقالعادهی نرمی و چقرمگی کامپوزیتهای شیشهی فلزی-گرافن در شکل (۴–۱۲) اساساً به دلیل تعداد افزایش یافتهی محلهای تشکیل باندهای برشی و نقش مسدودی لایههای گرافن میباشد، نمونههای IX و X به ترتیب متشکل از سه یا چهار گرافن درازتر (Å ۷۵۰ *L L*) با آرایشهای مختلف ساخته میشوند. گرافنها، درازتر، اما با تعداد کمتری در مقایسه با نمونههای IV و III هستند. منحنیهای تنش-کرنش مهندسی به دست آمده برای نمونههای IX و X تحت بار کششی در راستای محور *z* در شکل (۴–۱۳ الف) نشان داده شدهاند. همان طور که دیده میشود، با افزودن گرافن، نرمی و چقرمگی (مطابق جدول (۴–۶)) برای هر دو نمونه افزایش مییابد. لیکن، بهبود نرمی و چقرمگی در نمونههای IX و X خیلی کمتر از نمونههای IIV و III میباشد. دلیل آن این است که تعداد تقویتگرها و در نتیجه دهانهها کمتر میباشد که باعث میشود انرژی کرنش اعمالی در محلهای موضعی کمتری متمرکز شود و در نتیجه نانوکامپوزیتها در محدودهی کرنش پلاستیک محلهای موضعی کمتری متمرکز شود و در نتیجه نانوکامپوزیتها در محدوده کرنش پلاستیک کمتری در مقایسه با نمونههای IIV و III شکسته شوند. دلیل این امر این است که تعداد تقویتگرها موجب می شود انرژی کرنشی اعمال شده در تعداد محلی های موضعی کمتری تمرکز یافته و در نتیجه نانوکامپوزیت ها در محدودهی پلاستیک به طور قابل توجه کمتری شکسته شوند.



شکل (۴–۱۳) منحنیهای تنش-کرنش نمونههای IX ما و X (الف)، مکانیزم تغییر شکل نمونهی IX (ب) و نمونهی X (ج) در کرنشهای مختلف تحت بار کششی در راستای z.

جزئیات تغییر شکل نمونهی IX با تصاویری لحظهای از نمونهی بارگذاری شده در شکل (۴–۱۳ ب) نشان داده شده است. سه دهانهی موجود به عنوان مکانهایی عمل میکنند که تحت بار اعمالی تغییر شکل پلاستیک میدهند. در اینجا، زاویهی دهانه هموار بزرگ بوده به طوری که لایههای گرافن اجازه رشد و عبور باندهای برشی موضعی از عرض ماده را نمیدهند. با وجود این، برهمکنشهای فصل مشترک ماتریس-تقویت گر نمی توانند لایه های گرافن را از لغزش بازدارند. شکل (۴–۱۳ ج) مکانیزم تغییر شکل نمونه ی IX در گام های مختلف بار گذاری کششی را نشان می دهد. تغییر شکل پلاستیک ماتریس از سطوح آزاد در قسمت های تقویت نشده آغاز می گردد. در عین حال، گرافن ها تحت بار کششی اعمالی می لغزند که نهایتاً منجر به شکست نانو کامپوزیت در دو بخش انتهایی آن می شود. شکل الحاقی در شکل (۴–۱۳ ج) ساختار کامل و بدون شکست لایه های گرافن در نانو کامپوزیت شکسته شده در پایان آزمایش را نشان می دهد.

۴–۳–۶ نتیجه گیری

در این بخش، به طور خلاصه، نقشهای ممکن گرافن در تقویت شیشههای فلزی و بهبود نرمی و چقرمگی آنها با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی بررسی گردید. از این رو، مدلهای مختلفی از نانوکامپوزیت شیشهی فلزی-گرافن با در نظر گرفتن تعداد مختلف، آرایش و طول تقویت گر ساخته شد. گرافن پیوسته ایدهآل ترین حالت تقویت گری را دارد که استحکام و محدودهی پلاستیک نانوکامپوزیت را به شدت بهبود میبخشد؛ اگر چه اجرای آن از نظر عملی غیرممکن به نظر میرسد. لایهی گرافن همچنین باعث میشود که بار کرنش اعمالی در سراسر ماده پخش گردد. با وجود این، گرافنهای کوتاه که به کاربرد واقعی آنها نزدیک تر است توانستهاند سفتی، نرمی و چقرمگی شیشههای فلزی را به طرز چشم گیری بهبود بخشند. آنها دو نقش مهم را در تقویت ماتریسهای آمورف بازی کردند به طوری که از تشکیل یک باند برشی تنها و بنابراین از تمرکز تغییر شکل پلاستیک ماده

- ۱- لبههای انتهایی آنها در راستای محور بارگذاری به عنوان مکانهای تشکیل تغییر شکل
 پلاستیک عمل نمودند که منجر به افزایش تعداد باندهای برشی شدند.
- ۲- ساختار محکم گرافن ها از رشد و حرکت باندهای برشی شکل گرفته در عرض ماتریس جلوگیری نمودند.

در مقایسه با دیگر فازهای دوم مانند نانولولههای کربنی، گرافن با مساحت سطح بزرگتر به طور مؤثر مانعی قوی بر سر راه تشکیل و انتشار باندهای برشی فراهم می کند. با وجود این، حرکت لغزشی تقویت گر در درون ماتریس، مسیر را برای رشد باندهای برشی موضعی و سرانجام شکست ماده ایجاد می کنند. در مواد واقعی، عامل دار نمودن لایه های گرافن برای بهبود پیوند آن ها با ماتریس شیشه های فلزی میتواند از شکست زودهنگام کامپوزیت جلوگیری کرده و محدودهی پلاستیک کامپوزیت را افزایش دهد. نکتهی قابل توجه این که به دلیل محدودیت های محاسباتی موجود، اندازهی گرافن و واقعی ساخته میشوند خیلی کمتر است. با مقیاس بندی ابعاد ماتریس و گرافن استفاده شده در پژوهش حاضر، انتظار میرود ورقهای گرافن تولید شده به روش های تجربی با اندازههای خیلی بزرگتر، در حاضر، انتظار میرود ورقهای گرافن تولید شده به روش های تجربی با اندازههای خیلی بزرگتر، در

علاوه بر این، آرایش تقویت گرها و فصل مشترک ماتریس-تقویت گر عواملی کلیدی در ایجاد عدم تجانس در شیشههای فلزی تشخیص داده شدند که میتوان در طراحی و تولید کامپوزیتهای مبتنی بر شیشهی فلزی با نرمی و چقرمگی بهبود یافته مد نظر قرار داد.

فصل ينجم

نتايج

۵-۱- نتیجهگیری

در رسالهی حاضر، خواص مکانیکی فلزات و نانوکامپوزیتهای فلزی تقویت شده با نانوساختارهای نانولولهی کربنی، نانولولهی نیترید بور و گرافن با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. دو دسته از فلزات با ساختارهای اتمی متفاوت، یعنی، فلزات بلوری و شیشههای فلزی مطالعه گردید. از نانولولهی نیترید بور و صفحات گرافن برای بهبود رفتار مکانیکی فلزات کریستالی و از نانولولهی کربنی برای بهبود خواص مکانیکی شیشههای فلزی استفاده شد. نتایج شبیهسازیهای انجام شده بر روی نانوآلومینیم تک-کریستال در دو آزمایش کشش و فشار، به طور تقریبی مستقل بودن خواص مکانیکی آلومینیم از نرخ کرنش اعمالی را نشان میدهند. به جز این که برای نرخ کرنش نمونه شامل مدول الاستیک، نسبت پواسون و تنش تسلیم ایجاد می کند. به طوری با نزدیک شده دما به نقطهی ذوب، استحکام تسلیم ماده به سمت صفر میل می کند.

در نانوکامپوزیت آلومینیم-نانولولهی نیترید بور، از دو حالت متفاوت نانولولهی نیترید بور بلند و کوتاه برای تقویت خواص مکانیکی ماتریس آلومینیم استفاده گردید. تشکیل و انتشار نابجایی و تشکیل گلویی، دو مکانیزم تغییر شکل پلاستیک ماده بودند. سطوح لغزش برای هر دو بارگذاری کششی و فشاری در راستای صفحهی تنش برشی حداکثر مشاهده شد. در مجموع، نتایج به دست آمده، توانایی و دقت روش شبیه سازی دینامیک مولکولی در پیش بینی رفتار مکانیکی مواد فلزی و همچنین سازگاری آن با نتایج تجربی را به خوبی نمایان می سازد.

در نانوکامپوزیت آلومینیم-نانولولهی نیترید بور، از نانولولهی نیترید بور برای تقویت ماتریس آلومینیم استفاده گردید. نمودار تنش-کرنش مهندسی برای نانوکامپوزیت نانولولهی نیترید بور-آلومینیم برای هر دو بارگذاری کشش و فشار به دست آمد و تأثیر شرایط مرزی و همچنین طول نانولوله بررسی شد. علاوه بر این، تأثیر کسر اتمی و قطر نانولوله در رفتار مکانیکی کامپوزیت مطالعه گردید. نتایج، تأثیر قابل ملاحظهی نانولولهی نیترید بور بلند در تقویت سفتی و استحکام کششی نانوکامپوزیت را نشان میدهند. استحکام نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولولهی بلند با کسر اتمی ٪۸/۴ (٪۲/۱ وزنی) در آزمایش کشش، به اندازمی ٪۲۹/۴ افزایش پیدا کرد. مدول الاستیک کششی و فشاری آن نیز به ترتیب به اندازههای ./۸۲ و ./۹/۶۲ افزایش یافت. با افزایش کسر اتمی نانولولهی بلند، استحکام و مدول یانگ نانوکامپوزیت افزایش یافت. در بارگذاری کششی، برای کسر اتمی /۲۹/۷، استحکام و مدول یانگ به ترتیب به میزان /۴۵۰/۷٪ و ٪۲۷۱ نسبت به ماتریس خالص افزایش پیدا کردند؛ در بارگذاری فشاری نیز، به ترتیب به میزان ٪٬۵۴ و ٪٬۳۲۵۳۲ بهبود یافتند. تأثیر قطر نانولوله در خواص کششی نانوکامپوزیت قابل ملاحظه نیست. ولی، در خواص فشاری آن وابستگی قابل توجهی به قطر نانولوله مشاهده شد. به طوری که، با دو برابر کردن قطر (افزایش ٪۱۰۰)، استحکام نانوکامپوزیت به میزان ٪۲۶ کاهش یافت و مدول الاستیک آن نیز به اندازهی ٪۱۰/۵ افت پیدا کرد. افزودن نانولولهی نیترید بور بلند به ماتریس آلومینیم تأثیر قابل

ملاحظهی در مکانیزم تغییر شکل آن در بارگذاری داشت. نانولوله، محدودهی پلاستیک و توانایی جذب انرژی کرنشی ناشی از اعمال بار خارجی کامپوزیت را افزایش داد. نانولولهی بلند میتواند مسیر انتشار نابجایی را در بارگذاری کششی مسدود نماید. ولی در بارگذاری فشاری، نانولوله در راستای انتشار نابجایی و صفحهی لغزش دچار کمانش میشود.

بعد از آن، خواص و رفتار مکانیکی کامپوزیتهای نانولایهای فلز-گرافن برای فلزات مختلف در بارگذاری فشاری بررسی گردید. نتایج به دست آمده، تأثیر زیاد افزودن لایههای گرافن در استحکام و سفتی کامپوزیت را نشان میدهد. علاوه بر این، ضخامت لایههای فلزی، تأثیر قابل توجهی در استحکام نانوکامپوزیت میگذارد؛ به طوری که با افزایش ضخامت لایهی فلزی، استحکام کامپوزیت به سمت استحکام ماتریس خالص فلزی میل میکند. لایههای گرافن تأثیر قابل توجهی در مکانیزم تغییر شکل فلزات مس، نقره و طلا ایجاد میکند و مکانیزم را از تشکیل و انتشار نابجایی به تغییر شکل دوقلویی تغییر میدهد؛ به طوری که، از آنها موادی با خواص شبهالاستیک^۱ و حافظهی شکل^۲ به دلیل مکانیزم تغییر شکل دوقلویی^۲، میسازد که در کاربردهای مربوط به حوزهی فناوری نانو مورد توجه خاصی هستند.

در مورد نانوکامپوزیت شیشه یفلزی-نانولوله ی کربنی، تأثیر نانولوله ی کربنی در بهبود خواص مکانیکی و مکانیزم تغییر شکل شیشه های فلزی مطالعه گردید. دو حالت بلند و کوتاه برای نانولوله در شرایط مختلف بارگذاری کششی و فشاری در نظر گرفته شد. نتایج به دست آمده، تأثیر قابل توجه نانولوله یبلند در تقویت و بهبود خواص الاستیک و تغییر شکل پلاستیک نانوکامپوزیت را نشان می دهد. تقویت گر با مشارکت در تحمل بار کرنش اعمالی، توانایی جذب انرژی شیشه های فلزی را افزایش داد. رفتارهای کششی و فشاری متفاوتی برای نانوکامپوزیت شیشه ی فلزی تقویت شده با نانولوله یکربنی

¹ Pseudoelastic

² Shape memory

³ Deformation twinning

مشاهده گردید. علاوه بر این، تفاوت خواص نانوکامپوزیت در راستاهای طولی و عرضی، اهمیت پخش یکنواخت نانولوله در ماتریس فلزی در کاربردهای واقعی آن را آشکار میسازد.

در ادامه، برای حل مسألهی تردی و توانایی جذب انرژی پایین شیشههای فلزی، استفاده از گرافن به عنوان تقویت گر در ترکیب با آنها پیشنهاد شد. برای بررسی و تحلیل موضوع، مدلهای مختلفی از نانوکامپوزیت شیشههای فلزی-گرافن شامل آرایشهای متفاوتی از لایههای گرافن طراحی شد و رفتار مکانیکی و مکانیزم تغییر شکل آن تحت بار کششی مطالعه گردید. نتایج به دست آمده، تأثیر قابل ملاحظهی گرافن در تشکیل و انتشار باندهای برشی را نشان میدهند. با افزودن گرافن، سفتی، نرمی و چقرمگی شیشههای فلزی به طرز چشم گیری بهبود یافت. از یک طرف، لبههایی انتهایی گرافنهای کوتاه، تعداد مکانهای تشکیل باندهای برشی موضعی را افزایش داد. از طرف دیگر، ساختار داخلی محکم گرافنها از رشد و حرکت باندهای برشی تشکیل شدهی موضعی جلوگیری کرد. نتیجه این که، لایههای گرافن میتوانند تقویت گرهای خوبی برای بهود خواص مکانیکی شیشههای فلزی و همپنین افزایش نرمی و چقرمگی آنها باشند.

به طور خلاصه، نکات کلی زیر را میتوان به عنوان نتایجی از پژوهشهای انجام شدهی حاضر ذکر کرد که میتوان در طراحی و تولید مواد مهندسی و تجهیزات در مقیاس نانو مورد استفاده قرار داد:

- نانوساختارهای نانولولهی کربن و نیترید بور تقویت گرهای مناسبی برای تقویت و بهبود خواص مکانیکی فلزات میباشند. با ترکیب این نانوساختارها با فلزات، میتوان موادی کامپوزیت با خواص مکانیکی بهتری به دست آورد.
- کامپوزیتهای نانولایهای فلز-گرافن دارای خواص مکانیک بهبود یافته یفوق العادهای هستند.
 لایههای گرافن تأثیر زیادی در رفتار مکانیکی و مکانیزم تغییر شکل کامپوزیت تحت بار فشاری دارند؛ به طوری که با تغییر مکانیزم تغییر شکل فشاری از تشکیل و انتشار نابجایی به تغییر شکل در شکل دوقلویی در فلزات مس، نقره و طلا، خواص جالب سوپرالاستیک و حافظه یشکل در کامپوزیتهای نانولایه ای ایجاد می شوند.

لایههای گرافن میتوانند نرمی و چقرمگی شیشههای فلزی و مکانیزم تغییر شکل پلاستیک
 آنها را به طور قابل ملاحظهای بهبود بخشند. نتایج به دست آمده، استفاده از لایههای دوبعدی
 گرافن برای حل مسألهی تردی شیشههای فلزی واقعی را پیشنهاد می کنند.

۵-۲- پیشنهاد موضوع تحقیق

موضوعات تحقیقاتی مشابه زیر را می توان پیشنهاد نمود:

- ۱۰ انجام مجدد پژوهش حاضر برای آزمایشهای مکانیکی متفاوت مانند آزمایشهای خمشی و پیچشی و به دست آوردن خواص مکانیکی مربوطه به روش شبیهسازی دینامیک مولکولی و همچنین روشهای دیگر مانند مکانیک ساختاری و اجزاء محدود.
- بررسی خواص مکانیکی مختلف شیشههای فلزی به عنوان مواد مهندسی نسبتاً جدید از زمینه های فعال در مهندسی مکانیک میباشد و با استفاده از روشهای گوناگون تجربی، تئوری و
 محاسباتی پروژههای پژوهشی زیادی را میتوان تعریف کرد.
- با توجه به این که فصل مشتر ک ماتریس-تقویت گر تأثیر قابل ملاحظه ای در کارآیی تقویت گر دارد، بررسی تأثیر عوامل عامل دار کردن فصل مشتر ک با استفاده از گروه های عاملی^۱ با استفاده از روش های شبیه سازی اتمی، تحقیقی با ارزش بوده و می توان نتایج قابل توجهی را از آن به دست آورد.
- بررسی رفتار و خواص مکانیکی نانووایرها^۲ برای مواد فلزی مختلف و جهات مختلف بلوری یکی
 از زمینهی تحقیقاتی مطرح در علم نانومکانیک میباشد.
- مواد کامپوزیت فلزی با ترکیب فلزات بلوری و شیشههای فلزی به عنوان موادی جدید، یکی
 دیگر از زمینههای تحقیقاتی نوظهور میباشد.

¹ Functional groups

² Nanowires

پيوست الف

مبانی فیزیکی روش شبیهسازی دینامیک مولکولی

در این پیوست مبانی و اصول فیزیکی روش دینامیک مولکولی به طور خلاصه توضیح داده می شود. این اصول فیزیکی تحت عنوان فیزیک گرما به سه دستهی ترمودینامیک، نظریهی جنبشی، و مکانیک آماری قابل تقسیم است که در ادامه به آنها پرداخته می شود.

فیزیک گرما بخشی از علم گسترده فیزیک است که با گرما و موضوعات مربوط به آن سروکار دارد. چون گرما و سایر خواص مربوط به آن نظیر فشار و دما از مشخصات ماده به صورت چگال است، این موضوع بخشی از فیزیک ماده چگال را تشکیل میدهد. فیزیک گرما به سه بخش تقسیم میشود: ترمودینامیک، نظریهی جنبشی، و مکانیک آماری [۱۸۵].
الف-۱- مبانى ترموديناميكى

علم ترمودینامیک به خواص ماکروسکوپی مادهی چگال، چون دما، فشار و روابط میان آنها میپردازد بی آن که به ساختمان اتمی که اساس آنهاست اشارهای کند [۱۸۵]. نظریهی جنبشی روشی برای بیان فشار و دما و خواص ماکروسکوپی دیگر گازها برحسب مقادیر متوسط خواص مولکولها نظیر انرژی جنبشی میباشد. در مکانیک آماری رابطهی آماری میان ساختمان اتمی ماده و رفتار ماکروسکوپی آن به دست میآید. مکانیک آماری وسیلهای است برای فهم قوانین ترمودینامیک و پیشبینی روابط متعددی که میان متغیرهای ترمودینامیکی وجود دارند. ترمودینامیک و مکانیک آماری مکمل یکدیگر هستند. در واقع متغیرهای ترمودینامیکی جلوههای دیگری از رفتار اتمی مادهاند. کمیّتهای ترمودینامیکی نظیر دما و فشار، آثار جمعی خواص اتمیاند.

تعریف *میکروحالت*: حالتی که در آن مکان، سرعت و حالت کوانتومی یکایک اتمهای یک سیستم معین، جزء به جزء مشخص شده باشد.

تعریف *میکروحالت تعادل*: توزیع نسبتاً یکنواخت انرژیهای جنبشی و امتدادهای حرکت مولکولی. در این حالتها دما و فشار در سراسر گاز تقریباً یکسان هستند.

تعریف حالتهای تعادل ترمودینامیکی: حالاتی که حداکثر بینظمی دارند. سیستمها با گذشت زمان، پیوسته بینظمتر میشوند تا سرانجام به تعادل میرسند و کمیاتی چون دما و فشار در سرتاسر آن یکنواخت میشوند. همهی سیستمها از گرایش به افزایش بینظمی تا بیشترین حد ممکن و میل به تعادل ترمودینامیکی برخوردارند.

حالت ترمودینامیکی یک سیستم معین، با مشخص کردن مقدار چند متغیر حالت (متغیرهای مستقل) کاملاً معین می شود. مقادیر متغیرهای حالت دیگر (متغیرهای وابسته) به نحو منحصر به فردی از روی متغیرهای مستقل تعیین می شوند.

$$U = U(x, y, \dots, z)$$

U متغیر وابسته و x,y,...,z متغیرهای مستقل هستند. به طور ضمنی فرض می شود که این رابطه تابعی فقط برای حالتهای تعادل برقرار است. در مورد حالتهای ترمودینامیکی دو نکته مهم قابل ذکراند [۱۸۵]:

الف) حالتهای تعادلی وجود دارند که ماده چگال، در صورتی که به حال خود رها شوند، به آنها میل میکند.

ب) متغیرهایی ترمودینامیکی وجود دارند که به طور منحصر به فردی حالت تعادل را مشخص میکنند. به عبارت دیگر با مشخص کردن مقدار چند متغیر حالت مانند دما و فشار، حالت ترمودینامیکی آن سیستم کاملاً معین می گردد.

متغیر گرما نمی تواند متغیر حالت باشد، زیرا می توان انرژی را، به صورت گرما، به جسمی داد و به صورت انرژی مکانیکی از آن پس گرفت و در پایان دور عملیات، جسم را به حالت تعادل اولیه ش برگرداند. اگر گرما متغیر حالت باشد، باید به همان میزانی در دور عملیات دفع شود که جذب می شود تا Q در پایان کار، مقدار اولیه اش را بازیابد. انرژی جسم کمیتی است که بقا دارد و بنابراین متغیر حالت است. بسته به شرایط می تواند به صورت گرما یا کار مکانیکی از جسم گرفته شود. گرما آن بخش از انرژی جسم است که به صورتی بی نظم به آن داده یا از آن گرفته می شود و کار آن بخش از انرژی است که به صورت نظم یافته داده یا گرفته می شود.

دلیل این که ترمودینامیک کلاسیک به مطالعهی حالتهای تعادل محدود می شود این است که در حالت تعادل، انرژی گرمایی سیستم را، به آسانی و بدون ابهام، می توان از انرژی مکانیکی تمیز داد. ترمودینامیک با جزئیات اتمی سیستمها کاری ندارد؛ بلکه به حقایق تجربی تعادل گرمایی و روابط میان متغیرهای حالت می پردازد. از دیدگاه نظریهی اتمی، کمیّتهای قابل سنجشی که فشار و دما نامیده می شوند، تجلیات بزرگ-مقیاس حرکات اتمی هستند که در آنها تغییرات حرکات انفرادی اتمها حول مقادیر متوسط، یکدیگر را خنثی کردهاند. این مقادیر متوسط، وقتی سیستم در حداکثر بینظمی است، رابطههای سادهای با هم دارند. بررسی جزئیات این ارتباط متقابل برعهده مکانیک آماری است.

متغیرهای حالت و معادلات حالت

حالت سیستم با مشخص کردن مقادیر چند متغیر حالت، معین میشود. شماره متغیرهایی که لازم است تا یک حالت به طور منحصر به فرد مشخص شود، به سیستم و قیدهای آن بستگی دارد [۱۸۵]. متغیرهایی که با n (مقدار ماده) متناسباند (مانند انرژی داخلی و حجم) متغیرهای افزایشی مینامند. متغیرهایی که مستقل از n هستند (مانند فشار و دما) متغیرهای نافزایشی نامیده میشوند. در تعادل ترمودینامیکی، مقادیر متغیرهای نافزایشی در سراسر سیستم یکسان است، مگر آن که نیروهای خارجی، نظیر گرانش، دخالت کنند. چون گرما متغیر حالت نیست، مقدار گرمای لازم بستگی به طریقه افزودن ترمودینامیکی، مقادیر متغیرهای که لازم است مگر آن که نیروهای خارجی، نظیر گرانش، دخالت کنند. چون گرما متغیر حالت نیست، مقدار گرمای لازم بستگی به طریقه افزودن گرما به سیستم دارد. مقدار گرمایی که لازم است تا دما (T) را در حجم ثابت به اندازه یک درجه بالا برد، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت N نام دارد. گرمای لازم برای آن که T در فشار ثابت به اندازه یک درجه بالا درجه بالا رود، ظرفیت گرمایی در فشار ثابت Q است. ظرفیت گرمایی می و محم ثابت به اندازه یک درجه بالا درجه بالا رود، ظرفیت گرمایی در فشار ثابت Q است. ظرفیت گرمایی می و معی منای در حجم ثابت به اندازه یک درجه بالا درجه بالا رود، ظرفیت گرمایی در فشار ثابت می است. طرفیت گرمایی می و مرای آن که T در فشار ثابت به اندازه یک درجه بالا درجه بالا رود، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت به اندازه یک Q منه در فشار ثابت می مای در می مول از ماده Q می در فری Q است. ظرفیت گرمایی Q و Q متغیرهای حالت و در درجه بالا رود، ظرفیت گرمایی ویژه در حجم و فشار ثابت مینامند.

پارهای از خواص تجمعی سیستم، نظیر فشار و دما، که فقط به حالت سیستم بستگی دارد، متغیرهای حالت نامیده می شوند. فشار P (متغیر مکانیکی) متغیری ناافزایشی است. متغیر افزایشی که به P مربوط است، V حجم سیستم است. این دو متغیر که یک جفت متغیر فیزیکی هستند، نوعی انرژی مکانیکی μ را تعریف می کنند. n تعداد مولهای هر جسم شیمیایی (افزایشی)، متغیر ناافزایشی مربوط به آن μ پتانسیل شیمیایی جسم به ازای هر مول جسم است.

ترمودینامیک با مجموعهی کاملی از جفت متغیرهای حالت سروکار دارد که هر جفت آنها به تغییر و تبدیل خاصی در ساختار کلی سیستم مورد مطالعه مربوط میشود. از متغیرهای جفت *i*ام، یکی ناافزایشی است (*Y*_i) و دیگری افزایشی است (*X*_i). واحدهای این متغیرها چنان اختیار میشوند که اگر X_i به اندازهی dX_i تغییر کند، و سیستم در تعادل نگه داشته شود، افزایش یا کاهش انرژی سیستم X_i برابر $Y_i dX_i$ ژول است. تعداد این قبیل جفت متغیرها، بالقوه زیاد است. اما در هر زمان فقط به معدودی از آنها که در آزمایش مورد نظر دخالت دارند، نیاز است. رابطهی تجربی دیگری که لازم است، رابطهی میان جفت متغیر مکانیکی P و V (یا هر جفت متغیر دیگر) و دمای T در سیستم مورد مطالعه است. میان جفت متغیر مکانیکی عور به صورت معادلهای ریاضی بیان شود، معادلهی حالت نامیده می شود. برای هر جفت متغیر میان جفت متغیر مکانیکی از آنها که در آزمایش مورد نظر دخالت دارند، نیاز است. رابطه معدودی تجربی دیگری که از ماست، رابطه و میان جفت متغیر مکانیکی از تعایم مورد مطالعه است. میان جفت متغیر مکانیکی مورد نظر، باید یک معادله می حالت وجود داشته باشد [۱۸۵].

قوانین ترمودینامیک احکامی هستند به ظاهر بسیار ساده و هر یک بر خواص متعدد رفتار گرمایی ماده دلالت دارد. این قوانین مانند هر نظریه دیگر فیزیک، مفاهیم زیادی را با چند کلمه بیان می کنند. براساس قانون صفرم ترمودینامیک، هر دو سیستم که در تعادل گرمایی با سیستم سوم باشند، با هم در تعادل گرمایی خواهند بود. قانون اول ترمودینامیک چیزی نیست مگر بیان بقای انرژی، همراه با این نکته اضافی که گرما نیز صورتی از انرژی است. سادهترین صورت بیان قوانین اول و دوم ترمودینامیک حیزی نیست مگر بیان بقای انرژی، همراه با این مورت دیفرانسیلی که گرما نیز صورتی از انرژی است. سادهترین صورت بیان قوانین اول و دوم ترمودینامیک صورت دیفرانسیلی است. آنچه مهم است رابطه میان مقادیر انرژیهای مختلفی است که به آن جسم صورت دیفرانسیلی است. آنچه مهم است رابطه میان مقادیر انرژیهای مختلفی است که به آن جسم داده شده یا از آن گرفته شده است. قانون اول ترمودینامیک میگوید که هر سیستم ترمودینامیکی ادارای یک مخزن انرژی، به معنای عام آن، است که انرژی داخلی نامیده میشود و میتوان آن را با افزودن یا کاستن انرژی به معنای عام آن، است که انرژی داخلی نامیده میشود و میشوان آن را با میزودن یا کاستن انرژی به مینای در صورتهای آن را با مخان یک مخزن انرژی، به معنای عام آن، است که انرژی داخلی نامیده میشود و میتوان آن را با افزودن یا کاستن انرژی به هر یک از صورتهای آن تغییر داد. جمع جبری این مقادیر مختلف انرژی، محاسبات از آن گراسته شده برابر با U تغییر کل انرژی داخلی. در ترمودینامیک باید محاسبات را به تغییرات کند و گام به گام (تحولات شبه ایستا) محدود کرد تا فرمولها در حین تغییر محاسبات را به تغییرات کند و گام به گام (تحولات شبه ایستا) محدود کرد تا فرمولها در حین تغییر و W کار انجام شده توسط سیستم آوری داخلی برابر است با تفاضل Q گرمای داده شده به سیستم و W کر انرژی داخلی گرمای داده شده به سیستم و W کار اندو با می گرمای داده شده به سیستم و کام مر گرمای داده شده به سیستم و رست ای کرانم کرمای داده شده به سیستم و کام کار انجام شده به می با مولات شده برابر است با تفاض Q گرمای داده شده به سیستم از می که کار نیزمای داده شده به سیستم از کان

 $dU = \delta Q - \delta W = \delta Q - PdV + JdL + HdM + \cdots$ (الف-۱) که در آن L طول جسم، J نیروی کششی، M مغناطش کل جسم، و H شدّت میدان مغناطیسی میباشند. در تحولات تک دما، دمای سیستم در ضمن تحول ثابت میماند. تحول شبه ایستای دیگری هست که در ضمن آن سیستم از نظر گرمایی مجزا باشد، به طوری که $\delta Q = 0$. این تحول را تحول بیدررو (آدیاباتیک) گویند. ظرفیت گرمایی در چنین تحولی برابر صفر است. قانون اول را میتوان چنین نوشت [۱۸۵]: "انرژی را نمیتوان از بین برد."

$$dU = TdS - PdV + \sum \mu_i dn_i + JdL + HdM + \cdots$$
که در آن μ_i پتانسیل شیمیایی بر مول است. متغیرهای S ، V ، N ، L ، n ، V ، S مستند.
مشتقهای جزئی U نسبت به متغیرهای افزایشی، متغیرهای غیرافزایشیاند.

الف-۲- مباني نظريه جنبشي

نظریه جنبشی به بررسی خواص گرمایی ماده انباشته و تفصیل خواص اتمهای تشکیل دهنده آن می-پردازد. این ارتباط باید ارتباطی آماری باشد، و بنابراین برحسب احتمالات بیان خواهد شد. مفهوم احتمال تا اندازهای ذهنی است، و انتظاری را که از حاصل یک پیشامد (یا آزمایش) داریم به صورت کمی بیان میکند و تنها در صورتی قابل اندازه گیری است که آن پیشامد یا آزمایش را بتوان چندین بار تکرار کرد [۱۸۵].

پیشامدهای تصادفی: توزیع نتایج آزمایشهای متوالی هنگامی تصادفی است که هیچ الگویی در نتایج متوالی دیده نشود، یا این که تنها پبشبینیای که میتوان از نتیجه آزمایش بعدی کرد بیان احتمال نتایج گوناگون آن باشد.

توابع توزیع و یا توزیع احتمالهای نتایج ممکن یک پیشامد، تابع توزیع و یا توزیع احتمال نامیده می شود. تابع توزیع وسیلهای است برای مشخص کردن خواص آماری وضعیتی که در آن پیشامدهای تصادفی دخالت دارند. توابع توزیع زیادی برای بیان احتمال یک پیشامد شامل توزیع دوجملهای، توزیع نمایی، توزیع پواسون، و توزیع نرمال تعریف شدهاند [۱۸۵].

الف-۲-۱- توزيع دو جملهاي

تعداد راههای مختلفی که می توان N چیز مختلف را مرتب کرد، برابر N! است. $\frac{N!}{n!(N-n)!}$ تعداد راههای مختلفی که می توان به n موفقیت و N-n عدم موفقیت دست یافت. p^nq^{N-n} احتمال وقوع n موفقیت و N-n عدم موفقیت دست یافت. p^nq^{N-n} احتمال وقوع n موفقیت و N-n عدم موفقیت احت یافت. N-n احتمال وقوع n موفقیت و n-n

$$P_n(N) = \frac{N!}{n! (N-n)!} p^n q^{N-n}$$
 (Y-i)

q=n كه در آن $P_n(N)$ احتمال آن كه N آزمايش به n موفقيت و n-N عدم موفقيت منجر شود. $p_n(N)$ كه در آن $P_n(N)$ احتمال عدم موفقيت است. احتمال وقوع همه پيشامدهاى ممكن بايد برابر يک باشد، يعنى:1-p

$$\sum_{n=0}^{N} P_n(N) = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n! (N-n)!} = (p+q)^N = 1$$

الف-۲-۲- توزيع پواسون

تعریف تابع توزیع پواسون به صورت زیر است که احتمال وجود n نقطه در طول x را نشان میدهد [۱۸۵]:

$$P_n\left(\frac{x}{\lambda}
ight) = \int_0^x f(y) dy P_{n-1}\left(\frac{x-y}{\lambda}
ight) = \frac{(x/\lambda)^n}{n!} e^{-x/\lambda}$$
 (الف-۳)
 $P_n\left(\frac{x}{\lambda}
ight)$ احتمال آن که n نقطه که به تصادف بر یک خط اختیار میشوند در فاصلهای به طول x روی
این خط باشد. به طور کلی، توزیع دنبالهای از رویدادها در صورتی توزیع پواسون است که نتیجهی یک
رویداد، یک عدد صحیح مثبت باشد و احتمال این که این نتیجه، عدد صحیح n باشد عبارت است از:
 $P_n(E) = \frac{E^n}{n!} e^{-E}$

الف-۲-۳- توزيع نرمال

در حد مقادیر بزرگ N در توزیع دوجملهای یا مقادیر بزرگ E در توزیع پواسون، می توان متغیر n را متناسب با یک متغیر پیوسته x در نظر گرفت. در این صورت احتمال P_n در هر دو مورد به یک چگالی احتمال واحد (x) میل می کند. این تابع F(x) تنها یک بیشینه در مقدار مورد انتظار $\langle x \rangle = x$ دارد. تابع توزیع نرمال عبارت است از [۱۸۵]:

$$f(x - X) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(x - X)^2/2\sigma^2}$$
 (4)

انتگرال آن روی بازه (∞,∞) برابر یک است:

 $\int_{-\infty}^{\infty} f(x - X) dx = 1$ (الف-۵)

مقدار مورد انتظار و واریانس متغیر x به صورت زیر است:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x - X) dx = X$$
 (9-(1))

$$\langle (x-X)^2 \rangle = \sigma^2$$
 (۲–الف-۲)

این توزیع به توزیع بهنجار یا گاوسی معروف است و مبیّن رفتار سیستمی است که از تعداد بسیار زیادی عوامل تصادفی کوچک و مستقل از هم متأثر میشود.

الف-۲-۴- توزيع سرعتها

توزیعهای احتمال، حلقه اتصال خواص اتمی و تحولات ترمودینامیکیاند. با تعیین تابع توزیع f_i (یعنی مشخص کردن مقدار f_i برای همه میکروحالتهای قابل حصول سیستمی که در یک میکروحالت معین است) حالت ترمودینامیکی سیستمهای این گروه مشخص خواهد شد. f_i احتمال وجود سیستم در میکروحالت أاست) حالت ترمودینامیکی سیستمهای این گروه مشخص خواهد شد. f_i احتمال وجود سیستم در میکروحالت أام را نشان میدهد. در یک گاز کامل متشکل از N اتم نقطهای، هر اتم به احتمال متساوی می میکروحالت أام را نشان میدهد. در یک گاز کامل متشکل از N اتم نقطهای، هر اتم به احتمال متساوی می میکروحالت أام را نشان میدهد. در یک گاز کامل متشکل از N اتم نقطهای، هر اتم به احتمال متساوی می میتواند در هر نقطه از حجم V باشد. ولی توزیع سرعت اتمها به این یکنواختی نیست. تابع چگالی احتمال برای اتمی که به تصادف انتخاب می شود، احتمال آن که دارای اندازه حرکت معینی \tilde{P} (از نظر مقدار و امتداد) باشد مشخص میکند. چگالی احتمال f تابعی از مؤلفههای کارتزین (P, α, P_y, P_z) یا مقدار و امتداد) باشد مشخص میکند. چگالی احتمال f تابعی از مؤلفههای کارتزین (P, α, A, G) یا مقدار و امتداد) باشد مشخص میکند. چگالی احتمال $f(\vec{P})$ احتمال این که رأس \tilde{P} بردار اندازه حرکت اتم می اشد. اگر حالت سیستم تعادل نباشد، f ممکن کروی (R, α, β) بردار اندازه حرکت اتم می باشد. حرکت باشد. اگر حالت سیستم تعادل نباشد، f ممکن یک اتم گاز در جزء حجم V فضای اندازه حرکت باشد. اگر حالت سیستم تعادل نباشد، f ممکن است علاوه بر P به زمان هم بستگی داشته باشد. مطابق تعریف اساسی چگالی احتمال داریم [$f(\vec{P})$] است علاوه بر P به زمان هم بستگی داشته باشد. مطابق تعریف اساسی چگالی احتمال داریم [$f(\vec{P})$

$$\begin{aligned} \int \int f(r) dr p & \int_{-\infty}^{2\pi} dr y \int_{-\infty}^{2\pi} dr y \int_{-\infty}^{2\pi} dr y \int_{-\infty}^{2\pi} dr y \int_{-\infty}^{\infty} dr y \int_{-\infty}^{2\pi} dr \\ &= \int_{0}^{2\pi} d\beta \int_{0}^{2\pi} \sin(\alpha) d\alpha \int_{0}^{\infty} f(\vec{P}) P^{2} dP \\ &= 1 \\ \\ \text{aligned} \\ \text{auticly} iver (c) = 1 \end{aligned}$$

$$\langle K. E. \rangle_{\text{tran}} = \int_{0}^{2\pi} d\beta \int_{0}^{2\pi} \sin(\alpha) d\alpha \int_{0}^{\infty} f(\vec{P}) \left(\frac{P^2}{2m}\right) P^2 dP$$
 (الف-۹)
انرژی کل گازی که متشکل از N اتم نقطهای است عبارت است از:

 $N\langle K.E.\rangle_{\rm tran}$

اگر سیستمی دارای سرعت سوق متوسط $ec{V}$ باشد، رابطه مؤلفههای آن با تابع توزیع به صورت زیر خواهد بود:

$$V_x = \frac{P_x}{m} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{P_x}{m} dP_x \int_{-\infty}^{\infty} dP_y \int_{-\infty}^{\infty} dP_z f(\vec{P})$$

.
$$V_z$$
 و راوبط مشابهی برای V_y و V_z

تابع توزیع در حال تعادل، تابعی از مقدار اندازه حرکت P و مستقل از زوایای lpha و eta میباشد. اگر توزیع سه مؤلفه مستقل باشند آنگاه:

انحراف معیار هر یک از مؤلفههای اندازه حرکت نسبت به مقدار میانگین (صفر) است. مقدار میانگین σ انرژی جنبشی یک اتم از رابطه زیر به دست میآید:

$$\langle K.E. \rangle = 4\pi \int \frac{P^2}{2m} f(\vec{P}) P^2 dP$$

$$= \frac{1}{m\sigma^3 \sqrt{2\pi}} \int_0^\infty P^4 e^{-P^2/2\sigma^2} dP \qquad (11-i)$$

$$= \frac{3}{2} (\sigma^2/m)$$

از طرف دیگر انرژی جنبشی یک اتم برحسب دمای سیستم برابر $\frac{3}{2}kT$ است. در نتیجه واریانس متغیر اندازهی حرکت اتم برابر است با:

$$\sigma^2 = mkT$$
 (الف -۱۲)

m جرم اتم، k ثابت بولتزمن، و T دمای ترمودینامیکی سیستم است. در نتیجه، توزیع اندازه حرکت m انتقالی اتمهای گاز کامل در دمای T به شکل زیر به دست میآید که تابع توزیع ماکسول نامیده میشود: $f(\vec{P}) = (2\pi m k T)^{-3/2} e^{-P^2/2m k T}$ (الف -۱۳)

جگالی احتمال مولکولها در فضای اندازه حرکت است. این توزیع به دقت تمام با توزیع سرعت $f(\vec{P})$ های مولکولی در گازهای واقعی مطابقت دارد که توزیعی ساده و همسانگرد است. با توجه به رابطه تابع توزیع ماکسول داریم:

برای
$$P = 0 \implies f = f_{max}$$

برای $P \to \infty \implies f \to 0$
برای $P \to \infty \implies f \to 0$
باشد. dV_P احتمال این که بردار اندازه حرکت یک مولکول \vec{P} باشد و رأس این بردار در dV_P باشد.
میانگین بردار سرعت اتمها صفر است، چون توزیع اندازه حرکت متقارن است. میانگین اندازه سرعت
اتمها به طریق زیر به دست میآید:

$$\begin{split} \langle v \rangle &= \langle \frac{P}{m} \rangle = \frac{4\pi}{m} \int_0^\infty P^3 e^{-P^2/2mkT} \frac{dP}{(2\pi m kT)^{3/2}} \\ &= \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \end{split} \tag{17-1}$$

$$\langle v^2
angle = \langle rac{P^2}{m^2}
angle = 3(kT/m)$$
 (الف -۱۴)
میانگین انرژی جنبشی انتقالی مولکول ها با T متناسب است و میانگین سرعت مولکولی با \sqrt{T} .

الف-۲-۶- فضای فاز و توزیع در فضای فاز

چگالی احتمال f تابع مکان \hat{r} و اندازه حرکت \hat{p} مولکول (و شاید هم زمان) است. هدف این است که توزیع حرکتهای مولکولی را در فاصله بین برخوردها بر حسب اندازه حرکت و مکان تعیین نمود. فرض می شود که برخورد مولکول ها فقط موجب تصادفی شدن اندازه حرکت و مکان آنها به همان مفهوم توزیع می شود که برخورد مولکول ها فقط موجب تصادفی شدن اندازه حرکت و مکان آنها به همان مفهوم توزیع می شود که برخورد مولکول ها فقط موجب تصادفی شدن اندازه حرکت و مکان آنها به همان مفهوم توزیع می شود که برخورد مولکول ها فقط موجب تصادفی شدن اندازه حرکت و مکان آنها به همان مفهوم توزیع می شود که برخورد مولکول ها فقط موجب تصادفی شدن اندازه حرکت و مکان آنها به همان مفهوم توزیع می شود که برخورد مولکول ها فقط موجب تصادفی شدن اندازه حرکت و مکان آنها به همان مفهوم توزیع می شود که برخورد مولکول ها فقط موجب تصادفی شدن اندازه حرکت و مکان آنها به همان مفهوم توزیع می شود که برخورد مولکول ها فقط موجب تصادفی شدن اندازه حرکت و مکان آنها به همان مفهوم توزیع می شود که برخورد مولکول ها فقط موجب تصادفی شدن اندازه حرکت و مکان آنها به همان مفهوم توزیع می شود که برخورد مولکول ها فقط موجب تصادفی شدن اندازه حرکت و مکان آنها به همان مفهوم توزیع می شود که بر مورد مولکول در هر لحظه بر حسب شش مختصه می بر می می مود. وانی مؤلفه p_x (شاید می زمان) تعریف می شود. این فضای شدن بعدی "فضای فاز" نامیده می شود. مشتق زمانی مؤلفه ا

سرعت در فضای فاز، یعنی \dot{p}_{χ} آهنگ تغییرات اندازه حرکت مولکول است که برابر مؤلفه x نیروی وارد بر مولکول یعنی F_{χ} است.

$$\dot{p}_x = F_x = -\frac{\partial \phi}{\partial x}$$
 (الف -۵۱)

به ازای یک مولکول یک بعدی و یک میدان نیروی معین میتوان معادله مسیر را با استفاده از قانون بقای انرژی مکانیکی نوشت:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \phi(x) = const. \tag{19-}$$

در نتيجه:

$$p_x = \sqrt{2m[E - \phi(x)]}$$
(الف - ۱۷)

که معادلهی مسیر به ازای انرژی کل E است. بنابراین هر مسیری با یک مقدار بخصوص E، انرژی کل آن، مشخص میشود. در فضای فاز، هر یک از مسیرها روی هایپرسطحهای (سطوح پنج بعدی) انرژی ثابت واقعاند. اگر حرکت مولکولها محدود به ظرفی باشد، هایپرسطحهای انرژی ثابت E، سطوحی بستهاند. بسته به ماهیت انرژی پتانسیل (\vec{r}) مسیرهای واقع بر این سطوح ممکن است بسته (حرکت متناوب) و یا باز (حرکت غیرمتناوب) باشند. بقای انرژی و اندازه حرکت در برخوردهای کشسان هنوز رعایت میشود.

$E_a + E_b = E'_a + E'_b$

 $E'_a + E'_b = E'_a + E'_b$ به ترتیب هایپرسطحهای قبل و بعد از برخورد هستند. مقادیر دقیق $E'_a + E'_b$ و $E_a + E_b$ را شروط بقای اندازه حرکت معین میکند. به طور کلی یک جفت مولکول در اثر برخورد از مسیرهای E'_b اولیه خود ناپدید میشوند و سر از مسیرهای دیگری در فضای فاز در میآورند.

اگر نیرو پایستار باشد، هر مولکول در فاصله بین برخوردها علاوه بر انرژی جنبشی دارای انرژی پیانسیل ϕ هم باید باشد. پتانسیل $\phi(ec{r})$ هم خواهد بود. چگالی احتمال علاوه بر انرژی جنبشی تابع ϕ هم باید باشد. $dV_p = dV_p$ احتمال این که یک مولکول دارای اندازه حرکتی در جزء حجم $f(ec{r},ec{p})dV_rdV_p$ در نقطه $ar{r}$ (در فضای مکان) باشد. $dV_r = dxdydz$ در نقطه $ar{r}$ (در فضای مکان) باشد. هرگاه انرژی مولکول افزایش یابد، f کاهش خواهد یافت و هر اندازه دما کمتر باشد، این کاهش سریعتر خواهد بود.

هر ناحیه فضای فاز به حجم $dV_r dV_p$ در نقطه (\vec{r}, \vec{p}) حاوی $dV_r dV_p dV_r dV_p$ نقطه است. Nf = n چگالی احتمال حضور مولکولها در نقطه \vec{r} و \vec{p} فضای فاز، در زمان t است و $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ چگالی مورد انتظار نقاط در فضای فاز است. انتگرال f روی همه نواحی دسترس فضای فاز، برابر یک است به طوری که انتگرال ρ برابر N است. در یک ناحیه کوچک فضای فاز، نقاط فاز تقریباً با یک سرعت واحد $\{\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}, \dot{p}_x, \dot{p}_y, \dot{p}_z\}$ حرکت می کنند. برای حالتهای تعادل، معادله بولتزمن به صورت زیر است:

$$\left(egin{aligned} & (f \ egin{aligned} & (f \ egin{aligned} & (f \ eta \$$

$$grad_p f = -\frac{\vec{p}}{mkT} f_r f_p \tag{19-1}$$

با جایگزینی این رابطه در معادله بولتزمن به دست میآید:

$$\left(\frac{\vec{p}}{m}\right) \cdot \left[grad_r f_r + \left(\frac{f_r}{kT}\right)grad_r \phi\right] f_p = 0 \tag{14}$$

در نتيجه:

$$grad_r f_r = -\left(\frac{f_r}{kT}\right)grad_r \phi$$
 (الف -۲۱)
با حل این معادله نسبت به متغیر r تابع f_r به دست میآید:

 $f_r(\vec{r}) = Be^{-\phi/kT} \tag{17-1}$

پس در این صورت تابع توزیع عبارت خواهد بود از:

$$f(\vec{r},\vec{p}) = \frac{B}{(2\pi m k T)^{3/2}} exp\left[-\frac{1}{kT}\left(\frac{p^2}{2m} + \phi\right)\right]$$
(11)

این معادله، "تابع توزیع ماکسول-بولتزمن" میباشد. مطابق این فرمول احتمال وجود یک مولکول در نقطه \bar{r} و \bar{p} در فضای فاز را انرژی کل آن $(\bar{r}, \bar{p}) = H(\bar{r}, \bar{p})$ معین میکند. هر اندازه Hنقطه \bar{r} و \bar{p} در فضای فاز را انرژی کل آن $(\bar{r}, \bar{p}) = H(\bar{r}, \bar{p})$ معین میکند. هر اندازه $f_r(\bar{r}) = Be^{-\phi/kT}$ معین میکند. هر اندازه بزرگتر باشد، احتمال کمتر است. B باید طوری تنظیم شود که انتگرال $f(\bar{r}, \bar{p})$ بهنجار (نرمال) شده حجمی که گاز در فضای مکان اشغال کرده است، برابر واحد باشد. تابع (\bar{r}, \bar{p}) بهنجار (نرمال) شده است و ثابت B ثابت بهنجارش (نرمال سازی) f_r نامیده میشود. توزیعهای ماکسول و ماکسول -بولتزمن با طبیعت سازگارند.

الف-٣- مبانی مکانیک آماری

الف-٣-١- آنسامبلها و توابع توزيع

میکروحالت خاصی از یک سیستم ترمودینامیکی (مثلاً گاز متشکل از N ذره) را میتوان با انتخاب مقادیری برای 6N مختصه مکان و اندازه حرکت مشخص کرد. تابع توزیع عبارت است از چگالی احتمال آنکه سیستم این مقادیر مختصات را داشته باشد. انتخاب یک حالت ترمودینامیکی خاص (یک ماکروحالت) با انتخاب یک تابع توزیع خاص معادل است و بالعکس. وظیفه مکانیک آماری فراهم آوردن روشهای یافتن توابع توزیعی است که با ماکروحالتهای مشخصی متناطرند [۱۸۵]. بنابر مکانیک کلاسیک تابع توزیع سیستمی با $\Psi = 3N$ درجه آزادی عبارت است از [۱۸۵]:

$$f(q,p) = f(q_1, q_2, ..., q_{\psi}, p_1, p_2, ..., p_{\psi})$$
 (الف -۲۴)
 q ها مختصات و q ها اندازهی حرکت ذرّات هستند. $f(q,p)dV_qdV_p$ احتمال آن است که نقطه
 q سیستم، در هر لحظه زمانی اختیاری، در داخل جزء فضای فاز dV_qdV_p در موضع ψ_q , ..., p_q باشد.
 $dV_q = h_1 dq_1 h_2 dq_2 ... h_{\psi} dq_{\psi}$
 $dV_p = (dp_1/h_1)(dp_2/h_2) ... (dp_{\psi}/h_{\psi})$

به بیان عامتر، تابع توزیع، نماینده چگالی احتمال مجموعهای از سیستمهای مشابه هم است و نه یک سیستم تنها. تعداد زیادی سیستمهای یکسان تصور شود که همه در یک حالت ترمودینامیکی ولی هر یک از آنها در میکروحالت ممکن متفاوتی باشند. این مجموعه از سیستمهای نمونه یک آنسامبل از سیستمها نامیده میشود، آنسامبلی که با ماکروحالت مورد نظر متناظر است.

آنسامبلهای متفاوتی که نماینده حالتهای ترمودینامیکی متفاوتاند، دارای جمعیتهای متفاوتی از میکروحالتها هستند. تابع توزیع ماکروحالت تعداد نسبی سیستمهای آنسامبل را که در هر لحظه در میکروحالت معینی هستند، نشان میدهد. هر سیستم در آنسامبل دارای ψ مختصه q_i و ψ اندازه میکروحالت معینی هستند، نشان میدهد. هر سیستم در آنسامبل دارای ψ مختصه q_i و ψ اندازه حرکت p_i است. تابع هامیلتونی سیستم (q, p) با مجموع هامیلتونیهای مولکولی برابر است. این حرکت از رکت از است. تابع هامیلتونی سیستم و پتانسیل است که به صورت تابعی از ψ مختصه و اندازه حرکت بیان شده است. خون هر سیستم در آنسامبل از سیستمهای دیگر مجزا است. اندازه H هر کمیت، انرژی کل سیستم، انرژی جنبشی و پتانسیل است که به صورت تابعی از ψ مختصه و اندازه H هر حرکت بیان شده است. چون هر سیستم در آنسامبل از سیستمهای دیگر مجزا است. اندازه H سیستم مستقل از زمان خواهد بود، اگر چه بر اثر حرکت اتمهای تشکیل دهنده و واکنشهای متقابل بین آنها، p ها و q های مختلف سیستم با زمان تغییر میکنند.

حرکت نقطه سیستم در فضای فاز توسط معادلات حرکت سیستم معین می شود. معادلات هامیلتون حاکم بر سیستم عبار تند از:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$
, $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$, $i = 1, 2, ..., \psi$ (Ya- (Ya- 1))

H این معادلات ψ مؤلفه بردار سرعت \overline{U} نقاط سیستم را در فضای فاز برحسب 2ψ مؤلفه گرادیان H در فضای فاز به دست میدهند.

آنسامبل سیستمها را میتوان به صورت انبوهی از نقاط سیستم در فضایی نشان میدهد که هر نقطه آن مطابق معادلات (الف –۲۵) حرکت میکند. سرعت نقطه در فضای فاز با گرادیان H متناسب است. چگالی نقاط در هر ناحیه از فضای فاز با مقدار تابع توزیع f(q,p) در آن ناحیه متناسب است. سادهترین تابع توزیع، وقتی است که f در همه نقاط فضای فاز جزء در هایپرسطح H(q,p) = E

که در آن E ثابت است، صفر باشد. آنسامبل مربوط به این تابع توزیع را "آنسامبل میکروکانونی" مینامند. حالت مفیدتر وقتی است که f متناسب با exp[-H(q,p)/kT] باشد که متناظر با آنسامبل کانونی است. برای آنکه هر کدام از آنها ماکروحالتهای واقعی ترمودینامیکی را نشان دهند باید رابطهای میان تابع توزیع f آنسامبل و خواص ترمودینامیکی ماکروحالت متناظر با آنسامبل فرض شود. این رابطه مناسب، رابطه بین آنتروپی ماکروحالت و تابع توزیع آنسامبل نظیر است.

هر ماکروحالت ترمودینامیکی یک سیستم را میتوان به صورت آنسامبل سیستمهایی تجسم کرد که در میکروحالتهای گوناگون قرار گرفتهاند یا اینکه آن را به طور کمی برحسب یک تابع توزیع نمایش داد. این تابع توزیع f_v احتمال آن است که یکی از سیستمهای آنسامبل در حالت کوانتومی (الف -۲۶) (الف -۷

- باشد و یا اگر ماکروحالت طوری است که مکانیک کلاسیک معتبر است، این تابع چگالی احتمال
 - است که نقطه سیستم در فضای فاز دارای مختصات p_ψ است که نقطه سیستم در فضای فاز f(q,p)

اصل بنیادی که تابع توزیع را به خواص ترمودینامیکی ماکروحالت نماینده آنسامبل مربوط میسازد، نخستین بار توسط بولتزمن و سپس به صورت کلیتر توسط پلانک بیان شد. این اصل، آنتروپی S سیستم را از طریق معادله زیر به تابع توزیع مربوط میسازد:

$$S = -k \sum_{\nu} f_{\nu} ln(f_{\nu})$$
 , $\sum_{\nu} f_{\nu} = 1$ (114)

که در آن، k ثابت بولتزمن است.

الف- آنسامبل ميكروكانني

سادهترین راه برای به دست آوردن بستگی S و f_v به متغیرهای ترمودینامیکی سیستم این است که آنسامبلی از سیستمهایی که همه دارای یک انرژی هستند در نظر گرفته شود و سپس این انرژی و آنتروپی نظیر آن طوری تنظیم شوند که در شرایط قانون دوم ترمودینامیک صدق کنند. اگر تمام سیستمهای آنسامبل دارای یک انرژی باشند، باید همه حالتهای کوانتومی که دارای یک انرژی هستند متساوی الحتمال باشند، و یا به طور کلاسیک چگالی احتمال f(q,p) در فضای فاز باید در تمام نقاط سطح انرژی ثابت مقدار واحدی داشته باشد و در نقاط دیگر برابر صفر شود. چنین آنسامبلی، آنسامبل میکروکاننی نامیده می شود. آنسامبل میکروکاننی عبارت است از مجموعه سیستمهای مشابهی که انرژی آنها دقیقاً یکسان است. در عمل فراهم آوردن چنین آنسامبلی غیر ممکن است.

برای تعیین $S \ U$ و $U \ e$ غیره در این آنسامبل، نخست باید (U) تعداد حالتهای کوانتومی سیستم را که دارای انرژی U هستند به دست آورد، یا به طور کلاسیک باید مساحت هایپرسطح انرژی $U \ c$ ا در فضای فاز Ψ بعدی پیدا کرد. آنگاه آنسامبلی که معرف سیستم در حال تعادل با انرژی داخلی Uفضای فاز ψ بعدی پیدا کرد. آنگاه آنسامبلی که معرف سیستم در حال تعادل با انرژی داخلی Uاست، دارای آنتروپی $S = k \ ln(W)$ میباشد که در آن $W \ (یا \ \Omega)$ تابع Uاست. قانون دوم، رابطه بین U، $S = k \ ln(W)$ میباشد که در حال تعادل در دمای داده شده است، مشخص می کند. اگر $V \ c$ جم سیستم ثابت نگه داشته شود، تابع هلمهولتز $T = U \ F$ باید کمینه شود. اگر فشار ثابت نگه داشته شود، در آن صورت $S = V \ PV \ TS$ باید کمینه شود.

ب- آنسامبل کاننی

آنسامبل میکروکاننی توانسته است نشان دهد که اصول بنیادی مکانیک آماری با واقعیات ترمودینامیک و نظریه جنبشی مطابقت دارد. ولی دارای کمبودهایی است که کاربرد عام آن را مانع میشود. در وهله وم، اول، محاسبه تعداد میکروحالتهایی که دارای انرژی معینی هستند، همیشه آسان نیست. در وهله دوم، آنسامبل میکروکاننی متناظر با سیستمی با انرژی U است که کاملاً از بقیه جهان مجزا است، و این روش معمول برای تعبیه سیستمهای ترمودینامیکی نیست. معمولاً مقدار دقیق انرژی سیستم را نمی-روش معمول برای تعبیه سیستمهای ترمودینامیکی نیست. معمولاً مقدار دقیق انرژی سیستم را نمی-دانیم. در اغلب موارد دمای سیستم های ترمودینامیکی نیست. معمولاً مقدار دقیق انرژی سیستم را نمی-انسامبلی یافت که دما از پیش در آن وارد شده باشد، دیگر لازم نیست که برای به دست آوردن U و Sبه صورت توابعی از T تابع T را کمینه کنیم. در آنسامبلی که T در آن وارد شده این کار از پیش انجام گرفته است. تابع توزیع چنین آنسامبلی، که با سیستم در تماس با یک انبار گرما متناظر است، باید در شرایط زیر صدق کند [۱۸۵]: کمیّت آنترویی از معادله (الف -۲۷)

$$S = -k \sum_{\nu} f_{\nu} \ln(f_{\nu})$$

باید بیشینه گردد، مشروط بر اینکه $1 = \sum_{v} f_{v} = U$ و انرژی داخلی $\sum_{v} f_{v}E_{v} = U$ باشد. برای این کار از روش ضرایب لاگرانژ استفاده میشود. با اعمال رابطهی انرژی آزاد F = U - TS در تابع توزیع، دمای T وارد آنسامبل شده و F به صورت کمیّتی که در حالت تعادل در T و V کمینه شده است تعریف میشود. بنابراین جواب شرایط مسئله که با تعاریف ترمودینامیکی آنتروپی، دما و تابع هلمهولتز سازگار است، عبارت است از (برای جزئیات بیشتر به مرجع [۱۸۵] مراجعه شود):

$$f_{\nu} = \frac{1}{Z} e^{-E_{\nu}/kT} \tag{7A-(1-1)}$$

که در آن،

$$Z = \sum_{\nu} e^{-E_{\nu}/kT} = e^{-F/kT}$$
(۲۹- الف

آنسامبل نظیر این توزیع را "آنسامبل کاننی" مینامند. ثابت هنجارش Z به صورت تابعی از T و V را "تابع پارش" می گویند. بخشی از مزایای محاسبات با آنسامبل کاننی آن است که می توان تمام توابع ترمودینامیک را بر حسب تابع پارش حساب کرد. به عنوان مثال، انرژی آزاد، آنتروپی، و فشار به طریق زیر محاسبه می شوند:

$$F = -kT\ln(Z)$$
 , $S = -(rac{\partial F}{\partial T})_V$, $P = -(rac{\partial F}{\partial V})_T$ (۳۰- الف (۳۰- ۳) (الف KT) (۳۰- kT) (الف KT) (مواردی که جدایی بین انرژیهای مجاز متوالی E_V به طور قابل ملاحظه کوچکتر از kT باشد، می توان مکانیک کلاسیک را به کار برد و جمع روی حالات کوانتومی V سیستم را با انتگرال گیری روی

فضای فاز جانشین کرد. تابع توزیع چگالی احتمال f(q,p) برای سیستمی با ψ درجه آزادی خواهد بود:

$$f(q,p) = \frac{1}{h^{\psi}Z} e^{-H(q,p)/kT}$$
(1)(1)

که در آن،

$$Z = h^{\psi} \int \dots \int e^{-H(q,p)/kT} dV_q dV_p \tag{(T-1)}$$

که در آن H(q,p) تابع هامیلتونی سیستم برابر با مجموع انرژیهای جنبشی و پتانسیل برحسب p و p است. تابع توزیع کاننی را میتوان به عنوان تابع توزیع ماکسول-بولتزمن برای تمام سیستم تعبیر کرد.

خواص کلی آنسامبل کاننی

در مکانیک کلاسیک به جای E_v هامیلتونی H(q,p) را داریم و عده حالتهایی که دارای انرژی H اند، برابر است با $[\Omega(H)/h^{\psi}]$. که در آن $\Omega(H)$ مساحت سطح H ثابت در فضای Ψ بعدی H اند، برابر است با [$\Omega(H)/h^{\psi}$]. که در آن $\Omega(H)$ مساحت سطح H ثابت در فضای Ψ بعدی است که آرایش و اندازه حرکت سیستم را نمایش میدهد. کسری از سیستمهای آنسامبل که دارای انرژی H اند، متناسب با $\Gamma(H)e^{-H/kT}$ است که بیشینه آن در U = H است و در آن U در شرط انرژی H اند، متناسب با F = U - TS است که بیشینه آن در محق می کند. آنسامبل کاننی امتیازات دیگری اینکه دارد مخصوصا وقتی که نمایش خواص ترمودینامیکی سیستمهای مختلف در میان باشد. خواص را

می توان از تابع پارش به دست آورد. آنسامبل کاننی امکان میدهد که اثرات کلی ناشی از کوانتیده بودن انرژی سیستم و این که تمام مقادیر انرژی مجاز نیستند روی رفتار ترمودینامیکی بررسی شود.

ج- آنسامبل ماكروكانني

آنسامبل کاننی که یک سیستم N ذرّهای در دمای ثابت T را نشان میدهد، برای سیستمهایی نظیر بلور ساده و گاز کامل مدل مفیدی است. سیستمهای زیاد دیگری را نیز که پیچیدهتر از اینها باشند میتوان با آنسامبل کاننی نشان داد و خواص ترمودینامیک آنها را بر حسب ساختمان اتمی آنها بیان کرد. در این جا نوع عامتری از آنسامبل بحث خواهد شد که اجازه میدهد تجزیه پذیری تابع پارش به عوامل مخفوظ بماند و در عین حال تمایزناپذیری دقیقاً منظور گردند، صرفنظر از این که مقدار T چه باشد.

Z آنسامبل کاننی متغیرهای T، V و N را به عنوان متغیرهای مستقل به کار میبرد. تابع پارش N آن به معادله هلمهولتز، $T = -kT \ln Z$ ، منجر میشود که در حالت تعادل و وقتی که T، V و N آن به معادله هلمهولتز، کمینه است. در بررسی سیستمهای متشکل از ذرّات تمایزناپذیر، به کار بردن ثابت نگاه داشته شوند، کمینه است. در بررسی سیستمهای متشکل از ذرّات تمایزناپذیر، به کار بردن N، تعداد کل ذرّات، به عنوان متغیر مستقل مزاحم است. لازم است که متغیر مستقل را از N به μ ، پتانسیل بزرگ:

$\Omega = U - TS - \mu N = -PV$

به کار برده می شود که در حالت تعادل هنگامی که T، V، و μ ثابت نگاه داشته می شوند، کمینه است. بنابراین، در آنسامبل جدید که آن را آنسامبل ماکروکاننی می نامند، شرطی که روی آنسامبل میکروکاننی و کاننی گذاشته شده، که هر سیستم دقیقاً دارای N ذره باشد، برداشته می شود. به این ترتیب معادلات و شرایط جنبی که در تعیین تابع توزیع به کار می روند، کمتر از مورد آنسامبل کاننی محدود خواهند بود. یک میکروحالت آنسامبل ماکروکاننی، با تعداد ذرّات N موجود در سیستم نمونه و با اعداد کوانتومی بود. یک میکروحالت آنسامبل ماکروکاننی، با تعداد ذرّات N موجود در سیستم نمونه و با اعداد کوانتومی مشخص خواهد شد. به این ترتیب در یک ماکروحالت تعادل، تابع توزیع $f_{N\nu}$ باید در شرط زیر صدق کند [۱۸۵]:

$$S = -k \sum_{N,\nu} f_{N\nu} \ln f_{N\nu}$$
 (TT- (III)

که در آن مقدار S، با برقراری شرط زیر، بیشینه است:

$$\sum_{N,\nu} f_{N\nu} = 1 , \quad \sum_{N,\nu} E_{N\nu} f_{N\nu} = U , \quad \sum_{N,\nu} E_{N\nu} f_{N\nu} = \overline{N}$$
 (TF- (III))

که در آن، U، \overline{N} ، و S با روابط ترمودینامیکی معمولی، مانند $U = TS + \Omega + \overline{N}\mu$ و یا هر یک از دیگر معادلات، به هم مربوطاند. در آنسامبل ماکروکاننی، نه تنها نمونهها از نقطه نظر انرژی کم و بیش متفاوت خواهند بود، بلکه تعداد ذرّات N از یک نمونه به نمونه دیگر تغییر خواهد کرد. تنها انرژی میانگین U و میانگین تعداد ذرّات، \overline{N} ، که روی آنسامبل متوسط گرفته شوند، مشخص خواهد بود.

با به کارگیری روش ضرایب لاگرانژ جهت بیشینه کردن آنتروپی و اعمال رابطه ترمودینامیکی مربوطه، تابع توزیع f_{Nv} سیستم به دست میآید [۱۸۵]:

$$f_{N\nu} = \left(\frac{1}{Z}\right) exp\left(\frac{\mu N - E_{N\nu}}{kT}\right); \quad \mathcal{Z} = \sum_{N,\nu} exp\left(\frac{\mu N - E_{N\nu}}{kT}\right) \tag{74-10}$$

$$\Omega = -kT \ln \mathcal{Z} = -PV \tag{(16)}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \end{pmatrix}_{TV} = -\overline{N}; \quad \begin{pmatrix} \frac{\partial \Omega}{\partial T} \end{pmatrix}_{V\mu} = -S; \quad \begin{pmatrix} \frac{\partial \Omega}{\partial V} \end{pmatrix}_{T\mu} = -P; \quad C_{\nu} = T \begin{pmatrix} \frac{\partial S}{\partial T} \end{pmatrix}_{V\mu}$$

$$\mathcal{F} = \Omega + \mu \overline{N}; \quad U = \mathcal{F} + ST = \Omega + ST + \mu \overline{N}$$

$$(16i)$$

اینها معادلات آنسامبل ماکروکاننیاند. Z *تابع پارش بزرگ* نامیده می شود و برابر با مجموع تابع پارش-های کاننی Z(N) برای آنسامبل های با Nهای مختلف و با وزن های $e^{\mu N/kT}$ است:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\mu N/kT} Z(N) \; ; \quad Z(N) = \sum_{\nu} e^{-E_{N\nu}/kT}$$
 (٣٩- الف)

مانند مورد آنسامبل کاننی، همه خواص ترمودینامیکی سیستم را میتوان با مشتق گیری از Ω به دست آورد.

د- آنسامبل همفشار-هم آنتالپي (NPH)

$$\rho_i = \frac{r_i}{V^{1/3}}, \quad i = 1, 2, ..., N$$
(۴۰- الف)

هر مؤلفه ho_i عددی بدون واحد و بین صفر و یک است. در این الگوریتم، لاگرانژین به صورت زیر تعریف می شود:

$$L(
ho^{N}, \dot{
ho}^{N}, Q, \dot{Q}) = rac{1}{2}mQ^{2/3}\sum_{i=1}^{N} \dot{
ho}_{i} \cdot \dot{
ho}_{i} - \sum_{i < j}^{N}u(Q^{1/3}
ho_{ij}) + rac{1}{2}M\dot{Q}^{2} - \alpha Q$$
 (^{(الف - ۱})
در این معادله Q به عنوان حجم در نظر گرفته می شود. دو جمله اول در سمت راست لاگرانژین معمول
بر حسب متغیرهای جدید می باشند، جمله سوم انرژی جنبشی مربوط به حرکت Q است، و جمله
چهارم انرژی پتانسیل مربوط به Q را نشان می دهد. در این معادله α و M ثابت هستند.

ه، آنسامبل همدما-همفشار (NPT)

در بعضی شرایط مانند بررسی معادلات حالت و مطالعات مرزهای فازی، مطلوب تر آن است که شبیه-سازی را در فشار ثابت انجام دهیم. بسیاری از آزمایشها نیز تحت فشار و دمای ثابت انجام می گیرند، که در این شبیه سازی ها از آنسامبل هم دما – هم فشار استفاده می شود. بسیاری از روش هایی که برای کنترل دما در یک شبیه سازی استفاده می شوند را می توان برای کنترل فشار نیز استفاده نمود. یکی از روشهای کنترل فشار، تغییر در اندازه سل شبیهسازی است. تغییر در اندازه سل شبیهسازی میتواند به صورت همگن، یعنی بدون تغییر شکل سل، و یا به صورت ناهمگن، یعنی همراه با تغییر شکل سل، انجام پذیرد. باروستاتهای برندسن و اندرسن از نوع همگن هستند [۷۳].

پيوست ب

پتانسیلهای برهمکنش

بزرگترین جزء سازنده در یک شبیهسازی، مدلی است که برای سیستم فیزیکی مورد مطالعه به کار میرود. یک مدل اساساً از دو قسمت تشکیل شده است:

- ۱) برهم کنش بین مولکولهای سازنده سیستم، و
 - ۲) برهم کنش بین مولکولها و محیط اطراف.

انتخاب مدل در شبیهسازی به معنای انتخاب پتانسیل است. در واقع پتانسیل، ورودی اصلی هر شبیه-سازی کامپیوتری است. تابع پتانسیل به طور ضمنی، شکل هندسی مولکولهای مجزا و یا به طور دقیق تر ابر الکترونی آنها را توصیف می کند. این تابع از نظر انتقالی و چرخشی ثابت است و معمولاً تابعی از مکان نسبی اتمها نسبت به یکدیگر بوده و به موقعیت مطلق آنها وابسته نیست. ساده ترین انتخاب برای پتانسیل V این است که پتانسیلها را به صورت جمع برهم کنشهای جفت گونه بنویسیم [۷۳]:

$$V(r_1, r_2, ..., r_n) = \sum_{i} \sum_{j>i} \phi |r_i - r_j|$$
 (1-...)

تقریب جمع پذیر جفت گونه برای بررسی بسیاری از سیستمها نظیر فلزات و نیمرساناها تقریبی بسیار خام است.

ب-۱- سیستمهای اتمی

که

برای سیستمی شامل N اتم، انرژی پتانسیل آن را میتوان به جملاتی تقسیم کرد که به مختصات اتمهای مجزا، اتمهای جفتی، اتمهای سهتایی و غیره بستگی داشته باشد [۷۳]:

$$V(r_1, r_2, ..., r_n) = \sum_i V_1(r_i) + \sum_i \sum_{j>i} V_2(r_i, r_j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j>i} V_3(r_i, r_j, r_k)$$

+ ... (Y-...)

اوّلین جمله در این معادله $V_1(r_i)$ اثر یک میدان خارجی روی سیستم را نشان میدهد. سایر جملات برهم کنش بین ذرّات را نشان میدهند. مثلاً جملهی دوم V_2 نشان دهندهی پتانسیل جفتی بین اتم-هاست که به فاصله بین جفت اتم $|r_i - r_i|$ بستگی دارد. تعدادی از مدلهای پتانسیل جفتی به شرح زیر هستند [۷۳].

 $U(r) = \begin{cases} \infty & r \le \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases}$ که در آن، σ فاصله برش پتانسیل میباشد. ۲- یتانسیل کره نرم: این پتانسیل به صورت زیر تعریف می شود:

$$\begin{split} U(r) &= \begin{cases} \frac{k}{r^n} = \varepsilon_0 (\frac{\sigma}{r})^n \,, \ n > 3 & r \leq \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases} \end{split}$$

 كه در آن، σ فاصله برش تابع پتانسیل و $k = \varepsilon_0 \sigma^n$ میباشد. n متغیری است كه اغلب به صورت
 یک عدد صحیح انتخاب میشود. در اینجا نیز همانند كره سخت، جاذبه وجود ندارد؛ اما مولكول ها
 میتوانند به هم نزدیک شوند.

۳- پتانسیل چاه مربعی: این پتانسیل به صورت زیر تعریف می شود:

$$U(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma_1 \\ -\varepsilon & \sigma_1 < r \leq \sigma_2 \\ 0 & r > \sigma_2 \end{cases}$$

که در آن، z ثابت انرژی، r فاصلهی بین دو اتم و σ_1 و σ_2 دو مقدار ثابت فاصله هستند.

ب-۲- سیستمهای مولکولی

ارائه یک پتانسیل جفتی صحیح برای یک مولکول نسبت به یک پتانسیل اتمی به مراتب پیچیدهتر است. به دلیل طبیعت غیرکروی ابر الکترونی مولکولهای چند اتمی مسائل دیگری نظیر همپوشانی ab ناهمسانگرد، پراکندگی و نیروهای القایی وجود دارند. این مسائل را میتوان با استفاده از روشهای db initio نظیر روش هارتری-فاک^۱ و یا نظریه تابع چگالی^۲ حل کرد [۷۳]. یک روش ساده استفاده از روشهای نیمه تجربی برای نمایش تابع پتانسیل است، به گونهای که در این تابع، سهمهای مختلف مولکولی در نظر گرفته شوند. اوّلین مرحله در فرمول بندی یک پتانسیل مولکولی تشخیص سهمهای مولکولی مختلف است. این سهمها را میتوان از برهمکنشهای بینمولکولی و درونمولکولی تعیین کرد.

الف) پتانسیل پیوندی درونمولکولی

پتانسیل پیوندی اثر کشش پیوند را نشان میدهد. پتانسیل مورس^۳ مثالی از یک پتاسیل پیوندی نسبتاً دقیق میان دو اتم است [۷۳]:

$$u_b(r) = D_e \left[\exp\left(-2\alpha(l-l_0)\right) - 2\exp\left(-\alpha(l-l_0)\right) \right] \tag{(f-1)}$$

در این پتانسیل D_e انرژی تفکیک پیوند است و α ثابتی است که به جرم اتمها و شکل چاه پتانسیل وابسته است و l_0 فاصلهی طبیعی پیوندی یا فاصله مرجع میباشد. این پتانسیل دارای دو عیب است: اول آن که ارزیابی جمله نمایی از لحاظ محاسبات کامپیوتری هزینهبر است و دوم آن که مقدار سه

¹ Hartree-Fock method

² Density functional theory

³ Morse potential

متغیر پتانسیل D_e ، D_e و lpha باید تعیین شوند. میتوان این پتانسیل را حول فاصله تعادلی به صورت زیر بسط داد:

$$u_b(r) = \frac{K_b(r - r_e)^2}{2} \left[1 - \alpha(r - r_e) + \frac{7}{12}\alpha^2(r - r_e)^2 + \cdots \right] \qquad (\Delta - \omega)$$

که $K_b = 2D_e lpha^2$ میباشد. اگر فقط از جمله اول این معادله استفاده شود، پتانسیل پیوندی شکل قانون هوک را خواهد داشت، یعنی:

که تقریب خوبی برای پیوند در مولکولها میباشد.

ب) پتانسیل خمش زاویهای درون مولکولی

قانون هوک معمولاً هم برای پتانسیل زاویهای پیوندی و هم برای خمش خارج از صفحه مورد استفاده قرار می گیرد. پتانسیل زاویه پیوندی را میتوان از دو رابطه زیر تعیین کرد:

$$u_{\theta}(\theta) = \frac{K_{\theta}(\theta - \theta_0)^2}{2} \left[1 - \alpha(\theta - \theta_0) + \frac{7}{12}\alpha^2(\theta - \theta_0)^2 + \cdots \right] \qquad (\forall_{-\psi})$$

و در صورتی که تنها جمله اول در نظر گرفته شود:

$$u_{\theta}(\theta) = \frac{1}{2} K_{\theta}(\theta - \theta_0)^2 \tag{A-1}$$

در این روابط $K_{ heta}$ ثابت نیروی خمشی و $heta_0$ زاویه پیوندی نرمال یا مرجع است.

پ) پتانسیل خمش خارج از صفحه درون مولکولی

خمش خارج از صفحه معمولاً در مولکولهای مسطح با مراکز مثلثی رخ میدهد. انرژی خمش خارج از صفحه ناشی از جابهجایی اتم مثلثی در بالا و یا پایین صفحه مولکول میباشد. پتانسیل خمش خارج از صفحه به صورت زیر بیان میشود:

$$u_{\chi}(\chi) = \frac{1}{2} K_{\chi}(\chi - \chi_0)^2 \tag{9-1}$$

.در این معادله K_{χ} سهم خمش خارج از صفحه و χ_0 زاویه مرجع برای خمش خارج از صفحه میباشد.

ت) پتانسیل پیچشی درون مولکولی

پتانسیل پیچشی اثر چرخش حول پیوند را نشان میدهد و تابعی از زاویههای دووجهی ^۱ بوده و به صورت زیر تعریف میشود:

در این معادله *V_j* ارتفاع سد چرخش و زاویهی دووجهی و *j* تناوب میباشند.

ث) جملات تقاطعی درون مولکولی

در اصل هر حرکت مولکول با حرکتهای دیگر آن ترکیب می شود. در نتیجه، توصیف دقیقی از فیزیک و حرکت جملات تقاطعی لازم است تا ترکیب انواع متفاوت حرکت را نشان دهد. اثر ترکیب برهم کنش-های کشش-کشش بین پیوندهای ۱ و ۲ را می توان به صورت زیر نشان داد [۷۳]:

$$u(l_1, l_2) = \frac{K_{l_{1,2}}}{2} \left[\left(l_1 - l_{1,0} \right) \left(l_2 - l_{2,0} \right) \right] \tag{11-4}$$

مشاهدات تجربی، کاهش زاویه پیوند بین پیوندهایی را نشان میدهند که کشیدگی پیوند را برای حداقل کردن کشش القا می کنند. اثر کشیدگی پیوند و حرکت زاویهای پیوند را می توان از پتانسیل زیر به دست آورد:

$$u(l_1, l_2, \theta) = \frac{K_{l_{1,2}, \theta}}{2} \left[\left(l_1 - l_{1,0} \right) + \left(l_2 - l_{2,0} \right) \right] (\theta - \theta_0)$$
 (17-...)

در این پتانسیل دو پیوند ۱ و ۲ به یک اتم مشترک متصل می گردند و θ زاویه بین این دو پیوند است. حرکت پیچشی را می توان با حرکت خمش پیوند و کشش ترکیب کرد. ترکیب حرکات پیچشی و کششی را می توان از رابطه زیر به دست آورد:

$$u(l, \tau) = rac{K_{l,\tau}}{2} [(l - l_0)(1 + \cos(3\tau))]$$
 (۱۳-برهم کنش بین حرکت خمشی و کششی پیوند را میتوان به صورت معادله زیر نشان داد:

¹ Dihedral

$$u(\theta,\tau) = \frac{K_{\theta,\tau}}{2} \left[(\theta - \theta_0)(1 - \cos(\tau)) \right] \tag{14}$$

در مورد مولکولهای ایجاد کننده دو زاویه که در یک مرکز مشترک هستند اثر برهم کنشهای خمش-خمش را باید در نظر گرفت:

$$u(\theta_1, \theta_2) = \frac{K_{\theta_{1,2}}}{2} \left[\left(\theta_1 - \theta_{1,0} \right) \left(\theta_2 - \theta_{2,0} \right) \right]$$
(10-4)

ج) پتانسیل های جفتی حاصل از مکانیک مولکولی

میتوان انرژی یک سیستم مولکولی حاصل از برهم کنشهای جفتی را به صورت زیر به دست آورد:

$$E(r, l, \theta, \tau, \chi) = \sum_{nonbonds} u_{nb}(r) + \sum_{bonds} u_b(l) + \sum_{bending} u_{\theta}(\theta) + \sum_{(1, 2^{-1})} u_{r}(\tau) + \sum_{dihedral} u_{\tau}(\tau) + \sum_{out of plane} u_{\chi}(\chi) + \sum u_{cl} + \cdots$$

در این رابطه u_{nb} پتانسیل غیرپیوندی، u_b پتانسیل پیوندی، u_{θ} پتانسیل زاویه پیوندی، u_x پتانسیل پیچشی^۱, u_{χ} پتانسیل خمش خارج از صفحه (پیچش به صورت نامتعارف^۲) و u_{cl} پتانسیل کولمبی است. معادلهی (ب–۱۶) فقط جملات قطری را در بر می گیرد، اما میتوان آن را به سهمهای جملات تقاطعی مانند برهم کنشهای زاویه-پیوند بسط داد. معادلهی (ب–۱۶) به اساس فیزیکی مسئله توجه می کند. یک پتانسیل ترکیبی با لحاظ نمودن برهم کنشهای بینمولکولی و درونمولکولی مختلف به دست می آید. برای مثال، برای مدلسازی یک پلیمر میتوان یک پتانسیل کلی در نظر گرفت که شامل پتانسیل برای برهم کنشهای غیرپیوندی، پتانسیل برای خمش پیوندی و پتانسیل برای پیچش زاویه مقادیر متغیرهای پتانسیل بسیار حساس است. متغیرهای اشاره میشود. صحت پتانسیل بین مولکولی به مقادیر متغیرهای پتانسیل بسیار حساس است. متغیرهای زاویه ای و پیوندی را میتوان از دادههای اشعه مقادیر متغیرهای پتانسیل بسیار حساس است. متغیرهای زاویه میشود. محت پتانسیل بین مولکولی به

¹ Torsional potential

² Improper torsional

³ Microwave

غیرتجربی ضرایب دوم ویریال و آزمایشهای اشعه مولکولی حاصل میشوند. همچنین این متغیرها را میتوان با استفاده از روشهای نیمه تجربی و ab initio به دست آورد.

چ) پتانسیلهای مکانیک مولکولی

چندین پتانسیل مولکولی بهینه شده برای محاسبه خواص مولکولی مختلف وجود دارد. پتانسیل بهینه شده برای شبیهسازی مایع^۱ (OPLS) مورد توجه خاصی قرار دارد؛ زیرا به طور ویژهای برای بررسی خواص مایعات بهینه شده است. این پتانسیل به صورت زیر است [۷۳]:

$$E = \sum_{j>i} \left(\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^{6}} + \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right)$$
(14)

یک مثال دیگر از این نوع پتانسیلها، ساخت مدل کمکی با اصلاح انرژی^۲ (AMBER) است. انرژی حاصل از پتانسیل AMBER به صورت زیر محاسبه می گردد [۷۳]:

$$\begin{split} E &= \sum_{bonds} \frac{K_l}{2} (l - l_0)^2 + \sum_{angles} \frac{K_{\theta}}{2} (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{dihedrals} \sum_n \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\tau - \gamma)] \\ &+ \sum_{j>i} 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{1}{\nu dW_{scale}} \sum_{j>i}^{1.4terms} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \qquad (1 \wedge -\gamma) \\ &+ \sum_{H-bonds} \left(\frac{C_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{D_{ij}}{r_{ij}^{10}} \right) + \sum_{j>i} \frac{q_i q_j}{\varepsilon r_{ij}} + \frac{1}{EE_{scale}} \sum_{j>i}^{1.4terms} \frac{q_i q_j}{Dr_{ij}} \end{split}$$

در این معادله سه جمله اول برهم کنش پیوندی مولکول ها را نشان میدهند. جملات باقی مانده سهم برهم کنش های غیرپیوندی برای دافعه و پراکندگی (پتانسیل لنارد-جونز)، پیوند هیدروژنی (جمله ۱۲- برهم کنش های غیرپیوندی برای دافعه و پراکندگی (پتانسیل لنارد-جونز)، پیوند هیدروژنی (جمله I ، رهم کنش های الکتروندی (برهای نقطه ای q_i می باشند. متغیر s ثابت دی الکتریک و D متغیر های تجربی هستند.

پتانسیل مکانیک مولکولی^۳ (MM3) توصیف پیچیدهای از پتانسیلهای پیوندی و غیرپیوندی مختلف را در بر می گیرد. این پتانسیل به صورت زیر محاسبه می گردد [۷۳]:

¹ Optimized potential for liquid simulation

² Assisted model building with energy refinement

³ Molecular mechanics

$$\begin{split} E &= \sum_{bonds} \frac{K_{l}}{2} (l - l_{0})^{2} \left[1 - 2.55(l - l_{0}) + (\frac{7}{12}) 2.55(l - l_{0})^{2} \right] \\ &+ \sum_{angles} \frac{K_{\theta}}{2} (\theta - \theta_{0})^{2} \left[1 - 0.014(\theta - \theta_{0}) + 5.6 \times 10^{-5}(\theta - \theta_{0})^{2} - 7 \right. \\ &\times 10^{-7}(\theta - \theta_{0})^{3} + 9 \times 10^{-10}(\theta - \theta_{0})^{3} \right] \\ &+ \sum_{out \ of \ plane} \frac{K_{\chi}}{2} (\chi - \chi_{0})^{2} \left[1 - 0.014(\chi - \chi_{0}) + 5.6 \times 10^{-5}(\chi - \chi_{0})^{2} - 7 \right. \\ &\times 10^{-7}(\chi - \chi_{0})^{3} + 9 \times 10^{-10}(\chi - \chi_{0})^{3} \right] \\ &+ \sum_{dihedrals} \frac{1}{2} [V_{r1}(1 + \cos\tau) + V_{r2}(1 - \cos2\tau) + V_{r3}(1 + \cos3\tau)] \\ &+ \sum_{bond-angle} \frac{K_{l,\theta}}{2} \left[(l_{1} - l_{1,0}) + (l_{2} - l_{2,0}) \right] (\theta - \theta_{0}) \\ &+ \sum_{angle-angle} \frac{K_{\theta,\chi_{2}}}{2} (\theta_{1} - \theta_{1,0}) (\theta_{2} - \theta_{2,0}) \\ &+ \sum_{i>i} \varepsilon_{ij} \left[-2.25 \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{6} + 1.84 \times 10^{5} \exp\left(- \frac{12\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right) \right] \\ &+ \sum_{j>i} \frac{\mu_{i}\mu_{j}}{er_{ij}^{2}} (2\cos\theta_{i}\cos\theta_{j} - \sin\theta_{i}\sin\theta_{j}\cos(\phi_{i} - \phi_{j})) \end{split}$$

در این پتانسیل، دقت مربوط به جملات کشش پیوندی (جمله اول)، خمش زاویهای (جمله دوم) و خمش خارج از صفحه (جمله سوم) با استفاده از یک بسط مرتبه بالاتر بهبود مییابد. برای نشان دادن اثرات حرکت چرخشی (جمله چهارم) از سه تناوب متوالی استفاده میشود. یک مشخصه پتانسیل MM3 وارد کردن جملات تقاطعی حاصل از حرکت کششی-خمشی پیوند (جمله پنجم)، پیچشی-کششی (جمله ششم) و حرکتهای خمشی-خمشی (جمله هفتم) است. سهمهای غیر پیوندی برای دافعه و پخش توسط پتانسیل اصلاح شده باکینگهام (جمله هشتم) در نظر گرفته میشود. برخلاف پتانسیل AMBER، پتانسیل IM3 از قانون کولمب برای تعیین برهم کنشهای الکتروستاتیک استفاده نمی کند و در عوض به هر پیوند در مولکول یک گشتاور دو قطبی (جمله نهم) تخصیص میدهد و برهم کنش الکتروستاتیک کلی، جمع همه برهم کنشهای دوقطبی-دوقطبی ممکن است.

ب-۳- پتانسیلهای چندجسمی

برای تحصیل نتایج قابل اطمینان در شبیهسازی ذرّات، به کارگیری پتانسیلهای مناسب بسیار مهم است. پتانسیلهای جفتی ساده مانند پتانسیل لنارد-جونز نمیتواند خواص ویژه موادی مانند فلزات یا هیدروکربنها را با دقت کافی تولید نماید. در عوض، پتانسیلهای به اصطلاح چندجسمی مورد نیاز هستند، که در آن، نیروی بین هر دو ذره به موقعیت چند ذره مجاور وابسته است. رابطهی کلی پتانسیل-های چندجسمی به صورت زیر است [۷۳]:

$$U = \sum_{i=1}^{N} \left[\sum_{\substack{j=1\\i\neq j}}^{N} U(r_{ij}) - S_i(r_{i1}, \dots, r_{iN}) \right]$$
(Y--,-)

که از یک قسمت دافعه U به صورت پتانسیل جفتی و یک قسمت پیچیدهتر جاذبه S_i تشکیل شده است. جمله S_i برهم کنش بین چندین ذرّه به حساب میآید، به گونهای که نیروی روی هر ذرّه به تعداد و موقعیت ذرّات مجاور بستگی دارد. چنین پتانسیلهایی امکان مدلسازی پیوندهای موجود در مواد فلزی را فراهم میسازد.

در سالهای اخیر روشهای تجربی و نیمه تجربی زیادی برای شبیهسازی فلزات و مواد کوالانسی به وجود آمده است. در سال ۱۹۸۳، داو و باسک روش اتم محاط شده ^۱ (EAM) را برای فلزات با شبکه مکعبی وجوه مرکزدار منتشر کردند [۶۹، ۶۹]. این روش توسط جانسون و آدامس برای فلزات با شبکه مکعبی مرکزدار (bcc) توسعه یافت [۶۸۹، ۱۸۷]. سپس به پتانسیل MEAM بهبود یافت که همسایگی پیوند را نیز به حساب میآورد [۱۸۹، ۱۸۹]. آبل و ترساف این روش را به کار گرفتند و پتانسیل مشابهی را برای سیلیکون ارائه کردند [۱۹۱، ۱۹۱]. پتانسیل آنها توسط برنر به عنوان نقطه شروعی برای پتانسیل هیدروکربن استفاده شد [۱۹۲]. یک روش جایگزین توسط فینیس و سینکلار در سال ۱۹۸۴ ارائه شد

¹ Embedded Atom Method (EAM)

² Tight-bonding technique

نیمه تجربی از تئوری تابع چگالی^۱ میباشد. پتانسیل فینیس-سینکلار برای فلزات fcc براساس کار ساتن و چن به صورت زیر است [۱۹۴]:

$$U(r_{ij}) = \varepsilon \sum_{i=1}^{N} \left[\sum_{j=i+1}^{N} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^n - c \left[\sum_{j=1,\neq i}^{N} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^m \right]^{1/2} \right]$$
(1)

مانند پتانسیل لنارد-جونز این پتانسیل هم از دو بخش دافعه و جاذبه تشکیل شده است. بخش دافعه از نوع پتانسیل جفتی است در حالی که بخش جاذبه یک پتانسیل چندجسمی میباشد.

¹ Density functional theory

پيوست ج

نمونهای از کد برنامهنویسی در نرمافزار لمپس

در این پیوست، برنامه یمدل سازی و شبیه سازی نانو کامپوزیت آلومینیم تقویت شده با نانولوله ی نیترید بور آورده می شود. از این مدل در پروژه ی سوم در بخش ۳–۳ از فصل سوم مورد استفاده قرار گرفت. مدل سازی کامپوزیت از سه بخش مجزا تشکیل شده است. مدل کامپوزیت آلومینیم – نانولوله ی نیترید بور در بخش اول ساخته شده و مدل به دست آمده در فایل data.comp ذخیره می گردد. در بخش دوم از شبیه سازی، مدل نانو کامپوزیت ساخته شده در بخش اول، تحت آنسامبل NPT به تعادل ترمودینامیکی در دمای X 00 و فشار خارجی صفر رسانده می شود. سرانجام، در بخش سوم، ساختار به تعادل رسیده، تحت بار کرنشی خارجی قرار گرفته و پاسخ مکانیکی و نمودار تنش – کرنش آن به دست آورده می شود. ج-۱ مدل نانوکامپوزیت آلومینیم - نانولولهی نیترید بور

***** ##------ b 301 -----## dimension 3 units metal boundary pps atom style atomic equal 1.45 variable а variable m equal 16 # number of carbon atoms in azimuthal direction variable n equal 53 # number of pair-atoms group in length direction variable c egual 4.05 #04527 variable qap equal 2 #3.3576 # distance between matrix and nanotube variable equal (3*v_n+1)*v_a/2+v_a # half high of nanotube in the direction Lx of tension x variable equal 13*v_c # half depth of the specimen Ly variable equal v_Ly/2 Ly2 variable r equal sqrt(3)*v_a*v_m/2/3.1416+v_gap simbox block 0 \${Lx} 0 \${Ly} 0 \${Ly} units box # creating the outter shape of the region specimen create_box 3 simbox hole cylinder x \${Ly2} \${Ly2} \${r} 0 \${Lx} side out units box region # creating a cylinder incide cube reaion alu intersect 2 simbox hole # cobmining two preceding regions *************** lattice fcc \${c} create atoms 1 region alu *************** 26.98154 # Aluminum 1 mass 2 10.81 # Boron mass 14.0067 # Nitrogen mass 3 read_data data.bnnt add append offset 1 0 0 0 0 shift 0.0 \${Ly2} \${Ly2} velocity all create 300 4928459 mom yes rot yes dist gaussian units box **************** write_data data.comp

ج-۲ تعادل ترموديناميكي نانوكامپوزيت

Creating composite of BNNT and AI ##### ##------## dimension 3 boundary pps units metal atom_style atomic # from b301 in_data.al_bnnt read_data data.comp pair_style hybrid eam/alloy tersoff lj/cut 8 eam/alloy AI_wkg_MSMSE_2009.set AI NULL NULL pair_coeff ** pair_coeff ** tersoff BNC.tersoff NULL B N pair_coeff 12 lj/cut 0.045692 3.0133 # AI B pair coeff 13 lj/cut 0.056443 2.9693 # AL N fix 1 all npt temp 300 300 0.1 x 0 0 0.1 y 0 0 0.1

variable egual 1 temp variable 2 egual vol 2 ave/time 1 1 1000 v 1 v 2 file tv.txt fix all cfg 10000 ./cfg/*.cfg mass type xs ys zs id type dump 1 all element Al B N dump_modify 1 thermo 10000 timestep 0.0001 run 25000 timestep 0.0005 run 25000 timestep 0.001 50000 run ********************** write_restart restart.b301

ج-۳ بارگذاری مدل نانوکامپوزیت

Stretching composite of BNNT and Al ####### ##------ b 301 ------##

read_restart restart.b301

from b301

pair_style hybrid eam/alloy tersoff lj/cut 8 pair_coeff ** eam/alloy Al_wkg_MSMSE_2009.set Al NULL NULL pair_coeff ** tersoff BNC.tersoff NULL B N pair_coeff 1 2 lj/cut 0.045692 3.0133 #AIB pair_coeff 13 lj/cut 0.056443 2.9693 # AI N *************** fix 1 all nvt temp 10 10 0.1 variable 1 equal vol compute 1 all temp compute 2 all stress/atom 1 compute 3 all reduce sum c_2[1] c_2[2] c_2[3] fix 2 all ave/time 1 1000 1000 c_3[1] c_3[2] c_3[3] file stress.txt 3 all ave/time 1 1 1000 c_1 v_1 file tv.txt fix *************** fix 4 all deform 1 x erate 0.0001 units box 1 all cfg 200000 ./cfg/*.cfg mass type xs ys zs id type dump dump_modify 1 element AI B N timestep 0.001 2000000 run ********************* write restart restart.b302
- [1] Buehler M. J. (2008), "Atomistic Modeling of Materials Failure" Springer, USA.
- [2] Gülseren O., Ercolessi F. and Tosatti E. (1998), "Noncrystalline structures of ultrathin unsupported nanowires" **Phys. Rev. Lett.**, **80**, pp. **3775-8**.
- [3] Tosatti E., Prestipino S., Kostlmeier S., Corso A. D. and Tolla F. D. D. (2001), "String tension and stability of magic tip-suspended nanowires" Science. 291, pp. 288-90.
- [4] He L. H., Lim C. W. and Wu B. S. (2003), "A continuum model for size-dependent deformation of elastic films of nano-scale thickness" Int. J. Solids Struct., 41, pp. 847–57.
- [5] Bian Z., Wang R. J., Wang W. H., Zhang T. and Inoue I. (2004), "Carbon nano-tube reinforced Zr-based bulk metallic glasses composites and their properties" Advanced Functional Materials, 14, pp. 55-63.
- [6] Hsu C. F., Lin H. M. and Lee P. Y. (2008), "Characterization of mechanically alloyed Ti-based bulk metallic glass composites containing carbon nanotubes" Advanced Engineering Materials, 10, pp. 1053-5.
- [7] Silvestre N., Faria B. and Lopes, J. N. C. (2014), "Compressive behavior of CNTreinforced aluminum composites using molecular dynamics" Composites Science and Technology, 90, pp. 16-24.
- [8] Esawi A. M. K., Morsi K., Sayed A., Taher M. and Lanka S. (2010), "Effect of carbon nanotube (CNT) content on the mechanical properties of CNT-reinforced aluminium composites" Composites Science and Technology, 70, pp. 2237-41.
- [9] Hwang J., Yoon T., Jin S. H., Lee J., Kim T. S., Hong S. H. and Jeon S. (2013), "Enhanced mechanical properties of graphene/copper nanocomposites using a molecular-level mixing process" Adv. Mater., 25, pp. 6724-9.
- [10] Pavithra C. L. P., Sarada B. V., Rajulapoti K. V., Rao T. N. and Sundararajan D. (2014), "A new electrochemical approach for the synthesis of copper-graphene nanocomposite foils with high hardness" Sci. Rep., 4, p. 4049.
- [11] Trivedi S., Sharma S. C. and Harsha S. P. (2014), "Evaluations of young's modulus of boron nitride nanotube reinforced nano-composites" Procedia Materials Science, 6, pp. 1899 905.
- [12] Callister W. D. and Rethwisch D. G. (2012), "Fundamentals of Materials Science and Engineering: An Integraded Approach" 4th ed., John Wiley & Sons.
- [13] Bhushan B. (2004), "**Springer Handbook of Nanotechnology**" Spinger-Verlag, Berlin, Heidelberg, Germany.
- [14] Khan A., Suh Y. S., Chen X., Takacs L. and Zhang H. (2006), "Nanocrystalline aluminum and iron: Mechanical behavior at quasi-static and high strain rates, and constitutive modeling" Int. J. Plast., 22, pp. 195–209.
- [15] Groh S., Marin E. B., Horstemeyer M. F. and Zbib H. M. (2009), "Multiscale modeling of the plasticity in an aluminum single crystal" Int. J. Plast., 25, pp. 1456-73.

- [16] Yuan L., Shan D. and Guo B. (2007), "Molecular dynamics simulation of tensile deformation of nano-single crystal aluminum" J. Mater. Process. Technol., 184, pp. 1-5.
- [17] Guo Y., Zhuang Z., Li X. Y. and Chen Z. (2007), "An investigation of the combined size and rate effects on the mechanical responses of FCC metals" Int. J. Solids Struct., 44, pp. 1180-95.
- [18] Karimzadeh A., Ayatollahi M. R. and Alizadeh M. (2014), "Finite element simulation of nano-indentation experiment on aluminum 1100" Comput. Mater. Sci., 81, pp. 595–600.
- [19] Klement W., Willens R. H. and Duwez P. (1960), "Non-crystalline structure in solidified gold-silicon alloys" Nature, 187, pp. 869-70.
- [20] Chen, H. S. (1974), "The glass transition temperature in glassy alloys: Effects of atomic sizes and the heats of mixing" Acta Metall., 22, pp. 897-900.
- [21] Inoue A., Zhang T. and Masumoto T. (1989) "Al-La-Ni amorphous alloys with a wide supercooled liquid region" Mater. Trans. JIM, 30, pp. 965–72.
- [22] Inoue A., Zhang T. and Masumoto T. (1991), "Amorphous Zr-Al-TM (TM = Co,Ni,Cu) alloys with significant supercooled liquid region of over 100 K" Mater. Trans. JIM, 32, pp.1005–10.
- [23] Buschow K. H. J. (2013), "Handbook of Magnetic Materials" 1st edition.
- [24] Liu W. and Zhang L. (2015), "On the Nano/Micro-Mechanics of Metallic Glass" Crit. Rev. Solid State Mater. Sci., 40, pp. 137-63.
- [25] Inoue A. (2000), "Stabilization of metallic supercooled liquid and bulk amorphous alloys" Acta Metar., 48, pp. 279-306.
- [26] Amiya K. and Inoue A. (2008), "Fe-(Cr, Mo)-(C, B)-Tm bulk metallic glasses with high, strength and high glass-forming ability" **Rev. Adv. Mater. Sci.**, 27, p. 18.
- [27] Song K. K., Pauly S., Zhang Y., Scudino S., Gargarella P., Surreddi K. B., Kühn U. and Eckert J. (2011), "Significant tensile ductility induced by cold rolling in Cu_{47.5}Zr_{47.5}Al₅ bulk metallic glass" Intermetallics, 19, pp. 1394-8.
- [28] Yokoyama Y., Fujita K., Yavari A. R. and Inoue A. (2009), "Malleable hypoeutectic Zr-Ni-Cu-Al bulk glassy alloys with tensile plastic elongation at room temperature" Philos. Mag. Lett., 89, pp. 322–34.
- [29] Johnson W. L. (2002), "Bulk amorphous metal An emerging engineering material" Jom-J. Min. Met. Mat. Soc., 54, pp. 40-43.
- [30] Wang W. H., Dong C. and Shek C. H. (2004), "Bulk metallic glasses" Mater. Sci. Eng. R., 44, pp. 45-89.
- [31] Rodney D., Tanguy A. and Vandembroucq D. (2011), "Modeling the mechanics of amorphous solids at different length scale and time scale" Model. Simul. Mater. Sci., 19, p. 083001.
- [32] Schuh C. A., Hufnagel T. C. and Ramamurty U. (2007), "Overview No.144 Mechanical behavior of amorphous alloys" Acta Mater., 55, p. 4067.
- [33] Cavagna A. (2009), "Supercooled liquids for pedestrians" Phys. Rep., 476, p. 51.

- [34] Turnbull D. and Fisher J. C. (1949), "Rate of nucleation in condensed systems" J. Chem. Phys., 17, p. 71.
- [35] Drehman A. J., Greer A. L. and Turnbull D. (1982), "Bulk formation of a metallic glass: Pd40Ni40P20" Appl. Phys. Lett., 41, p. 716.
- [36] Cheng Y. Q. and Ma E. (2011), "Atomic-level structure and structureproperty relationship in metallic glasses" **Prog. Mater. Sci.**, 56, p. 379.
- [37] Clarke A. S. and Jonsson H. (1993), "Structural changes accompanying densification of random hard-sphere packings" **Phys. Rev. E**, **47**, p. **3975**.
- [38] Shao Y., Yao K. F., Li M. and Liu X. (2013), "Two-zone heterogeneous structure within shear bands of a bulk metallic glass" **Appl. Phys. Lett.**, **103**, p. **171901**.
- [39] Ogata S., Shimizu F., Li J., Wakeda M. and Shibutani Y. (2006), "Atomistic simulation of shear localization in Cu-Zr bulk metallic glass" Intermetallics, 14, p. 1033.
- [40] Cao A. J., Cheng Y. Q. and Ma E. (2009), "Structural processes that initiate shear localization in metallic glass", Acta Mater., 57, p. 5146.
- [41] Shi Y. F. and Falk M. L. (2005), "Strain localization and percolation of stable structure in amorphous solids" **Phys. Rev. Lett.**, **95**, p. **095502**.
- [42] Shi Y. F. and Falk M. L. (2007), "Stress-induced structural transformation and shear banding during simulated nanoindentation of a metallic glass" Acta Mater., 55, p. 4317.
- [43] Shimizu F., Ogata S. and Li J. (2007), "Theory of shear banding in metallic glasses and molecular dynamics calculations" **Mater. Trans.**, **48**, p. **2923**.
- [44] Wakeda M., Shibutani Y., Ogata S. and Park J. (2008), "Multiple shear banding in a computational amorphous alloy model" **Appl. Phys. A Mater.**, **91**, p. **281**.
- [45] Schirmacher W. (2006), "Thermal conductivity of glassy materials and the "boson peak" **Europhys Lett.**, **73**, p. **892**.
- [46] Schirmacher W., Ruocco G. and Scopigno T. (2007), "Acoustic attenuation in glasses and its relation with the boson peak" **Phys. Rev. Lett.**, **98**, p. **025501**.
- [47] Chen S. H., Chan K. C. and Xia L. (2015), "Fracture morphologies of Zr-based bulk metallic glasses under different stress states" Adv. Eng. Mater., 17, pp. 366-73.
- [48] Hussain F., Imran M., Rashid M., Ullah H., Shakoor A., Ahmad E. and Ahmad S. A. (2014), "Molecular dynamics simulation of mechanical characteristics of CuZr bulk metallic glasses using uni-axial tensile loading technique", Phys. Scr., 89, p. 115701.
- [49] Zhao P., Li S., Gao G., Bai B. and Misra R. D. K. (2015), "Mechanical behavior of carbon nanotube-reinforced Mg–Cu–Gd–Ag bulk metallic glasses" Mater. Sci. Eng. A, 641, pp. 116-122.
- [50] Pal H. and Sharma V. (2015), "Effect of sintering on mechanical and electrical properties of carbon nanotube based silver nanocomposites" Indian J. Phys., 89, pp. 217-24.
- [51] Cha S. I., Kim K. T., Arshad S. N., Mo C. B. and Hong S. H. (2005), "Extraordinary strenghening effect of carbon nanotubes in metal-matrix nanocomposites processed by molecular-lavel mixig" Adv. Mater., 17, pp. 1377-81.

- [52] Tatarko P., Grasso S., Porwal H., Chlup Z., Saggar R., Dlouhy I. and Reece M. J. (2014), "Boron nitride nanotubes as a reinforcement for brittle matrices" J. European Ceramic Society, 34, pp. 3339-49.
- [53] Wei B. X., Wang M. S., Bando Y. and Golberg D. (2010), "Tensile tests on individual multi-walled boron nitride nanotubes" Adv. Mater., 22, pp. 4895-9.
- [54] Yamaguchi M., Pakdel A., Zhi C., Bando Y., Tang D. M., Faerstein K., Shtansky D. and Golberg D. (2013), "Utilization of multiwalled boron nitride nanotubes for the reinforcement of lightweight aluminum ribbons" Nanoscale Research Letters, 8.
- [55] Lee C., Wei X. D., Kysar J. W. and Hone J. (2008), "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene" Science, 321, pp. 385-8.
- [56] Georgiou T., Britnell L., Blake P., Gorbachev R. V., Gholinia A., Geim A. K. et al. (2011), "Graphene bubbles with controllable curvature" Appl. Phys. Lett., 99, p. 093103.
- [57] Balandin A. A. (2007), "Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials", **Nat. Mater.**, 2011, pp. 569-81.
- [58] Fan Y., Wang L., Li J., Li J., Sun S., Chen F., Chen L. and Jiang W. (2010), "Preparation and electrical properties of graphene nanosheet/Al2O3 composites" Carbon, 48, pp. 1743-9.
- [59] He T., Li J., Wang L., Zhu J. and Jiang W. (2009), "Preparation and consolidation of alumina/graphene composite powders" Mater. Trans., 50, pp. 749–51.
- [60] Lee C., Wei X., Kysar J. W. and Hone J. (2008), "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene" Science, 321, pp. 385-8.
- [61] Wang J., Li Z., Fan G., Pan H., Chen Z. and Zhang D. (2012), "Reinforcement with graphene nanosheets in aluminum matrix composites" Scr. Mater., 66, pp. 594-7.
- [62] Chen L. Y., Konishi H., Fehrenbacher A., Ma C., Xu J. Q., Choi H., Xu H. F., Pfefferkorn F. E. and Li X. C. (2012), "Novel nanoprocessing route for bulk graphene nanoplatelets reinforced metal matrix nanocomposites" Scr. Mater., 67, pp. 29-32.
- [63] Koltsova T. S., Nasibulina L. I., Anoshkin I. V., Mishin V. V., Kauppinen E. I., Tolochko O. V. and Nasibulin A. G. (2012), "New hybrid copper composite materials based on carbon nanostructures" J. Mater. Sci. Eng. B, 2, pp. 240-6.
- [64] Nasibulin A. G., Koltsova T., Nasibulina L. I., Anoshkin I. V., Semencha A., Tolochko O. V. and Kauppinen E. I. (2013), "A novel approach to composite preparation by direct synthesis of carbon nanomaterial on matrix or filler particles" Acta Mater., 61, pp. 1862-71.
- [65] Kim Y., Lee J., Yeom M. S., Shin J. W., Kim H., Cui Y., Kysar J. W., Hone J., Jung Y., Jeon S., Han S. M. (2013), "Strengthening effect of single-atomic-layer graphene in metal–graphene nanolayered composites" Nat. Commun., 4, p. 2114.
- [66] Kuang D., Xu L., Liu L., Hu W. and Wu Y. (2013), "Graphene–nickel composites" Appl. Surf. Sci., 273, pp. 484-90.
- [67] Satoh A. (2011), "Introduction to Practice of Molecular Simulation: Molecular Dynamics, Monte Carlo, Brownian Dynamics, Lattice Boltzmann, Dissipative Particle Dynamics", Elsevier.

- [68] Daw M. and Baskes (1983), "Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals" **Phys. Rev. Lett.**, **50**, pp. **1285-8**.
- [69] Daw M. and Baskes (1984), "Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals" **Phys. Rev. B**, **29**, pp. **6443-53**.
- [70] J. Tersoff (1988), "New empirical approach for the structure and energy of covalent systems" **Phys. Rev. B**, **37**, p. **6991**.
- [71] Liao M. L., Wang Y. C., S. P. Ju, T. W. Lien, and L F. Huang (2011), "Deformation behaviors of an armchair boron-nitride nanotube under axial tensile strains" J. Appl. Phys., 110, p. 054310.
- [72] Albe K. and Moller W. (1998), "Modelling of boron nitride: Atomic scale simulations on thin film growth" **Comput. Mater. Sci.**, **10**, pp. **111-5**.
- گو هر شادی ۱.، موسوی م. و موسوی ف.، (۱۳۸۷) "مبانی شبیهسازی دینامیک مولکولی" انتشارات [73] دانشگاه فر دوسی، دانشگاه فر دوسی، مشهد.
- [74] Allen P. M. (2004), "Introduction to Molecular Dynamics Simulation", John von Neumann Institute for Computing, Jülich, NIC Series, 23, ISBN 3-00-012641-4, pp. 1-28.
- [75] Field M. J. (2007), "A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems" Second Edition, Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- [76] Berendsen H. J. C., Postma J. P. M., Gunsteren W. F. V., Di Nola A. and Haak J. R. (1984), "Molecular dynamics with coupling to an external bath" J. Chem. Phys., 81, pp. 3684–90.
- [77] Nosé S. (1984), "A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods" J. Chem. Phys., 81, pp. 511–19.
- [78] Hoover W. G. (1985), "Canonical dynamics: equilibrium phase-space distributions" Phys. Rev. A, 31, pp. 1695–7.
- [79] Martyna G. J., Klein M. L. and Tuckerman M. E. (1992), "Nosé–Hoover chains: the canonical ensemble via continuous dynamics" J. Chem. Phys., 97, pp. 2635–43.
- [80] Dao D. V., Nakamura K., Bui T. T. and Sugiyama S. (2010), "Micro/nanomechanical sensors and actuators based on SOI-MEMS technology" Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol., 1, pp. 013001.
- [81] Ekinci K. L. and Roukes M. L. (2005), "Nanoelectromechanical systems" Rev. Sci. Instrum., 76, pp. 061101.
- [82] Rapaport D. (2004), "The Art of Molecular Dynamics Simulation" second ed., Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- [83] Narayan K., Behdinan K. and Fawaz Z. (2007), "An engineering-oriented embeddedatom-method potential fitting procedure for pure fcc and bcc metals" J. Mater. Process. Technol. 182, pp. 387–97.
- [84] Nath S. K. D. (2014), "Elastic, elastic–plastic properties of Ag, Cu and Ni nanowires by the bending test using molecular dynamics simulations" Comput. Mater. Sci., 87, pp. 138–144.

- [85] Ikeda H., Qi Y., Cagin T., Samwer K., Johnson W. L. and Goddard W. A. (1999), "Strain rate induced amorphization in metallic nanowires" Phys. Rev. Lett., 82, pp. 2900-3.
- [86] Koh S. J. A. and Lee H. P. (2006), "Molecular dynamics simulations of size and strain rate dependent mechanical response of FCC metallic nanowires", Nanotechnol. 17, pp. 3451-67.
- [87] Wu H. A. (2004), "Molecular dynamics simulation of loading rate and surface effects on the elastic bending behavior of metal nanorod" Comput. Mater. Sci., 31, pp. 287– 91.
- [88] Ozgen, S. and Duruk, E. (2004), "Molecular dynamics simulation of solidification kinetics of aluminium using Sutton–Chen version of EAM" Mater. Lett., 58, pp. 1071-5.
- [89] Mendelev M. I., Srolovitz D. J., Ackland G. J. and Han S. (2005), "Effect of Fe segregation on the migration of a non-symmetric sigma-5 tilt grain boundary in Al" J. Mater. Res., 20, pp. 208-218.
- [90] Song H. Y. and Zha X. W. (2010), "Influence of nickel coating on the interfacial bonding characteristics of carbon nanotube–aluminum composites" Comput. Mater. Sci., 49, pp. 899–903.
- [91] Beer F. P., Johnston E. R. and Dewolf J. T. (2006), "Mechanics of Materials" 4th edition, McGraw Hill.
- [92] Terrones M., Romo-Herrera J. M., Cruz-Silva E., López-Urías F., Muñoz-Sandoval E., Velázquez-Salazar J. J., Terrones H., Bando Y., Golberg D. (2007), "Pure and doped boron nitride nanotubes" Mater. Today, 10(5), pp. 30-38.
- [93] Griebel M., Hamaekers J., Heber H. (2009), "A molecular dynamics study on the impact of defects and functionalization on the Young modulus of boron-nitride nanotubes" Comput. Mater. Sci., 45, pp. 1097-1103.
- [94] Griebel M., Hamaekers J. (2007), Molecular dynamics simulations of boron-nitride nanotubes embedded in amorphous Si-B-N" **Comput. Mater. Sci.**, **39**, pp. **502-517**.
- [95] Xue Y., Jiang B., Bourgeois L., Dai P., Mitome M., Zhang C., et al. (2015), "Aluminum matrix composites reinforced with multi-walled boron nitride nanotubes fabricated by a high-pressure torsion technique" Mater. Des., 88, pp. 451-460.
- [96] Lahiri D., Hadjikhani A., Zhang C., Xing T., Li L. H., Chen Y., Agarwal A. (2013), "Boron nitride nanotubes reinforced aluminum composites prepared by spark plasma sintering: Microstructure, mechanical properties and deformation behavior" Mater. Sci. Eng. A, 574, pp. 149-156.
- [97] Filippova V. P., Kunavin S. A., and Pugachev M. S. (2015), "Calculation of the Parameters of the Lennard_Jones Potential for Pairs of Identical Atoms Based on the Properties of Solid Substances" Inorg. Mater. Appl. Res., 6 (1), pp. 1-4.
- [98] Kang J. W. and Hwang H. J. (2004), "Comparison of C60 encapsulations into carbon and boron nitride nanotubes" J. Phys. Condens. Matter, 16, pp. 3901-8.
- [99] Baowan D. and Hill J. M. (2007), "Nested boron nitride and carbon-boron nitride nanocones" Micro Nano Lett., 2, pp. 46-49.

- [100] Plimpton S. (1995), "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics" J. Comp. Phys., 17, pp. 1-19.
- [101] Liu X. Y., Wang F. C., Wu H. A., Wang W. Q. (2014), "Strengthening metal nanolaminates under shock compression through dual effect of strong and weak graphene interface" Appl. Phys. Lett., 104, p. 231901.
- [102] Yamakov V., Wolf D., Phillpot S. R., Mukherjee A. K., Gleiter H. (2002), "Dislocation processes in the deformation of nanocrystalline aluminum by moleculardynamics simulation" Nat. Mater., 1, pp. 45-49.
- [103] Diao J., Gall K., Dunn M. L. (2004), "Yield strength asymmetry in metal nanowires" Nano Lett., 4, pp. 1863–7.
- [104] Seo J. H., Yoo Y., Park N. Y., Yoon S. W., Lee H., Han S., Lee S. W., Seong T. Y., Lee S. C., Lee K. B., Cha P. R., Park H. S., Kim B., Ahn J. P. (2011), "Superplastic deformation of defect-free Au nanowires via coherent twin propagation" Nano Lett., 11, pp. 3499–502.
- [105] Park H. S., Gall K., Zimmerman J. A. (2005), "Shape memory and pseudoelasticity in metal nanowires", Phys. Rev. Lett., 95, p. 255504.
- [106] Han W. Z., Carpenter J. S., Wang L., Beyerlein I. J., Mara N. A. (2012), "Atomiclevel study of twin nucleation from face-centered-cubic/body-centered-cubic interfaces in nanolamellar composites" Appl. Phys. Lett., 100, p. 011911.
- [107] Mendelev M. I., Kramer M. J., Hao S. G., Ho K. M., Wang C. Z. (2012), "Development of interatomic potentials appropriate for simulation of liquid and glass properties of NiZr2 alloy" Phil. Mag., 92, pp. 4454-69.
- [108] Mendelev M. I., Srolovitz D. J., Ackland G. J., Han S. (2005), "Effect of Fe segregation on the migration of a non-symmetric sigma-5 tilt grain boundary in Al" J. Mater. Res., 20, pp. 208-218.
- [109] Williams P. L., Mishin Y., Hamilton J. V. (2006), "An embedded-atom potential for the Cu-Ag system" Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 14, p. 817.
- [110] Grochola G., Russo S. P., Snook I. K. (2005), "On fitting a gold embedded atom method potential using the force matching method" J. Chem. Phys., 123, p. 204719.
- [111] Mendelev M. I., Kramer M. J., Becker C. A., Asta M. (2008), "Analysis of semiempirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu" Phil. Mag., 88, pp. 1723-50.
- [112] Kinaci A., Haskins J. B., Sevik C., Cagin T. (2012), "Thermal conductivity of BN-C nanostructures" **Phys. Rev. B**, 86, p. 115410.
- [113] Salamanca-Riba L. G., Isaacs R. A., LeMieux M. C., Wan J., Gaskell K., Jiang Y., Wuttig M., Mansour A. N., Rashkeev S. N., Kuklja M. M., Zavalij P. Y., Santiago J. R., Hu L. (2015), "Synthetic crystals of silver with carbon: 3D epitaxy of carbon nanostructures in the silver lattice" Adv. Funct. Mater., 25, pp. 4768–77.
- [114] Li B. Q., Sui M. L., Mao S. X. (2011), "Twinnability predication for FCC metals" J. Mater. Sci. Technol., 27, pp. 97-100.
- [115] Zhen S., Davies G. J. (1983), "Calculation of the Lennard-Jones n–m potential energy parameters for metals" **Phys. Status Solidi A**, **78**, pp. **595-605**.

- [116] Filippova V. P., Kunavin S. A., Pugachev M. S. (2015), "Calculation of the parameters of the lennard jones potential for pairs of identical atoms based on the properties of solid substances" **Inorg. Mater. Appl. Res.**, 6, pp. 3-6.
- [117] Kang J. W., Choi Y. G., Lee J. H., Kwon O. K., Hwang H. J. (2008), "Molecular dynamics simulations of carbon nanotube oscillators deformed by encapsulated copper nanowires" Mol. Simul., 34, pp. 829–35.
- [118] Zhang Y., Liu F. (2011), "Maximum asymmetry in strain induced mechanical instability of graphene: Compression versus tension" Appl. Phys. Lett., 99, p. 241908.
- [119] Myagchilov S., Dawson P. R. (1999), "Evolution of texture in aggregates of crystals exhibiting both slip and twinning" **Model. Simul. Mater. Sci. Eng.**, 7, pp. 975-1004.
- [120] Chin G. Y., Hosford W. F., Mendorf D. R. (1969), "Accommodation of constrained deformation in f.c.c. metals by slip and twinning" Proc. Math. Phys. Eng. Sci., 309, pp. 433-56.
- [121] Cahn J. W., Mishin Y., Suzuki A. (2006), "Coupling grain boundary motion to shear deformation" Acta Mater., 54, pp. 4953–75.
- [122] Hu Q., Li L., Ghoniem N. M. (2009), "Stick-slip dynamics of coherent twin boundaries in copper" Acta Mater., 57, pp. 4866-73.
- [123] Miller R. E., Shenoy V. B. (2000), "Size-dependent elastic properties of nanosized structural elements" Nanotechnol., 11, pp. 139-147.
- [124] Tadmora E. B., Bernstein N. (2004), "A first-principles measure for the twinnability of FCC metals" J. Mech. Phys. Solids, 52, pp. 2507 – 19.
- [125] Louzguine-Luzgin D. V. and Inoue A. (2013), "Chapter Three Bulk Metallic Glasses: Formation, Structure, Properties, and Applications" Handb. Magn. Mater., 21, pp. 131-171.
- [126] Huang J. and Rodrigue D. (2014), "The effect of carbon nanotube orientation and content on the mechanical properties of polypropylene based composites" Mater. Des., 55, pp. 653–63.
- [127] Frankland S. J. V., Harik V. M., Odegard G. M., Brenner D. W., and Gates T. S. (2003), "The stress–strain behavior of polymer–nanotube composites from molecular dynamics simulation" Compos. Sci. Technol., 63, pp. 1655–61.
- [128] Montazeri A., Sadeghi M., Naghdabadi R., and Rafii-Tabar H. (2011), "Multiscale modeling of the effect of carbon nanotube orientation on the shear deformation properties of reinforced polymer-based composites" Phys. Lett. A, 375, pp. 1588–97.
- [129] Rouhi S., Alizadeh Y., and Ansari R. (2014), "Molecular dynamics simulations of the single-walled carbon nanotubes/poly (phenylacetylene) nanocomposites" Superlatt. Microstruct., 72, pp. 204–18.
- [130] Neubauer E., Kitzmantel M., Hulman M., and Angerer P. (2010), "Potential and challenges of metal-matrix-composites reinforced with carbon nanofibers and carbon nanotubes" Compos. Sci. Technol., 70, pp. 2228–36.
- [131] Melendez I. M., Neubauer E., Angerer P., Danninger H., and Torralba J. M. (2011), "Influence of nano-reinforcements on the mechanical properties and microstructure of titanium matrix composites" Compos. Sci. Technol., 71, pp. 1154–62.

- [132] Meguid S. A. and Jahwari F. A. (2014), "Modeling the pullout test of nanoreinforced metallic matrices using molecular dynamics" Acta Mech., 225, pp. 1267-75.
- [133] Daoush W. M., Lim B. K., Mo C. B., Nam D. H., and Hong S. H. (2009), "Electrical and mechanical properties of carbon nanotube reinforced copper nanocomposites fabricated by electroless deposition process" Mater. Sci. Eng. A, 513–514, pp. 247-53.
- [134] Kim K. T., Cha S. I., Hong S. H., and Hong S. H. (2006), "Microstructures and tensile behavior of carbon nanotube reinforced Cu matrix nanocomposites" Mater. Sci. Eng. A, 430, pp. 27–33.
- [135] Suryanarayana C. and Inoue A. (2010), "**Bulk Metallic Glasses**" CRC Press, Taylor & Francis, USA.
- [136] Park E. S. and Kim D. H. (2005), "Design of Bulk Metallic Glasses with High Glass Forming Ability and Enhancement of Plasticity in Metallic Glass Matrix Composites: A Review" Met. Mater. Int., 11, pp. 19-27.
- [137] Siegrist M. E. and Löffler J. F. (2007), "Bulk metallic glass-graphite composites" Scripta Mater., 56, pp. 1079–82.
- [138] Wu F., Chan K. C., Jiang S., Chen S., and Wang G. (2014), "Bulk metallic glass composite with good tensile ductility, high strength and large elastic strain limit" Scient. Rep., 4, p. 5302.
- [139] Bian Z., Pan M. X., Zhang Y., and Wang W. H. (2002), "Carbon-nanotubereinforced Zr_{52.5}Cu_{17.9}Ni_{14.6}Al₁₀Ti₅ bulk metallic glass composites" Appl. Phys. Lett., 81, p. 4739.
- [140] Sheng H. W., Kramer M. J., Cadien A., Fujita T., and Chen M. W. (2011), "Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals," Phys. Rev. B, 83.
- [141] Tersoff J. (1989), "Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems," Phys. Rev. B, 39.
- [142] Sevik C., Kinaci A., Haskins J. B., and Çagın T. (2011), "Characterization of thermal transport in low-dimensional boron nitride nanostructures," **Phys. Rev. B**, 84.
- [143] Sevik C., Sevincli H., Cuniberti G., and Çagın T. (2011), "Phonon Engineering in Carbon Nanotubes by Controlling Defect Concentration," Nano Lett., 11, pp. 4971– 7.
- [144] Lindsay L. and Broido D. A. (2010), "Optimized Tersoff and Brenner empirical potential parameters for lattice dynamics and phonon thermal transport in carbon nanotubes and graphene," **Phys. Rev. B**, **81**.
- [145] Liew K. M., He X. Q., and Wong C. H. (2004), "On the study of elastic and plastic properties of multi-walled carbon nanotubes under axial tension using molecular dynamics simulation" Acta Mater., 52, pp. 2521–7.
- [146] Song X., Gan Z., Liu S., Yan H., and Lv Q. (2009), "Computational study of thermocompression bonding of carbon nanotubes to metallic substrates," J. Appl. Phys., 106.

- [147] Choi B. K., Yoon G. H., and Lee S. (2016), "Molecular dynamics studies of CNTreinforced aluminum composites under uniaxial tensile loading" Composites Part B, 91, pp. 119–25.
- [148] Kim Y., Lee J., Yeom M. S., Shin J. W., Kim H., Cui Y., et al. (2013), "Strengthening effect of single-atomic-layer graphene in metal–graphene nanolayered composites" **Nat. Commun.**, **4**, p. **2114**.
- [149] Filippova V. P., Kunavin S. A., and Pugachev M.S. (2015), "Calculation of the parameters of the Lennard-Jones potential for pairs of identical atoms based on the properties of solid substances" **Inorgan. Mater.: Appl. Res.**, 6, pp. 1-4.
- [150] Zhen S. and Davies G. J. (1983), "Calculation of the Lennard- Jones n-m potential energy parameters for metals" **Phys. Stat. Sol.**, **78**, pp. **595-605**.
- [151] Kang J. W., Choi Y. G., Lee J. H., Kwon O. K., and Hwang H. J. (2008), "Molecular dynamics simulations of carbon nanotube oscillators deformed by encapsulated copper nanowires" Mol. Simul., 34, pp. 829–35.
- [152] Xu D., Lohwongwatana B., Duan G., Johnson W. L., and Garland C. (2004), "Bulk metallic glass formation in binary Cu-rich alloy series $Cu_{100-x}Zr_x$ (x = 34, 36, 38.2, 40 at.%) and mechanical properties of bulk $Cu_{64}Zr_{36}$ glass" Acta Mater., 52, pp. 2621-4.
- [153] Diao J., Gall K., and Dunn M. L. (2004), "Atomistic simulation of the structure and elastic properties of gold nanowires," J. Mech. Phys. Solids, 52, pp. 1935-62.
- [154] Feng S., Qi L., Wang L., Pan S., Ma M, X. Zhang, et al. (2015), "Atomic structure of shear bands in Cu₆₄Zr₃₆ metallic glasses studied by molecular dynamics simulations" Acta Mater., 95, pp. 236-43.
- [155] Banhart F. (2009), "Interactions between metals and carbon nanotubes: at the interface between old and new materials" **Nanoscale**, **1**, pp. **201–213**.
- [156] Zhong C., Zhang H., Cao Q. P., Wang X. D., Zhang D. X., Ramamurty U., et al. (2016), "On the critical thickness for non-localized to localized plastic flow transition in metallic glasses: A molecular dynamics study" Scripta Mater., pp. 93–97.
- [157] Guo H., Yan P. F., Wang Y. B., Tan J., Zhang Z. F., Sui M. L., et al. (2007), "Tensile ductility and necking of metallic glass," Nat. Mater., 6, pp. 735-9.
- [158] Tian L., Shan Z. W., and Ma E. (2013), "Ductile necking behavior of nanoscale metallic glasses under uniaxial tension at room temperature," Acta Mater., 61, pp. 4823-30.
- [159] Sun B. A. and Wang W. H. (2015), "The fracture of bulk metallic glasses" Prog. Mater. Sci., 74, pp. 211–307.
- [160] Gludovatz B., Naleway S. E., Ritchie R. O., and Kruzic J. J. (2014), "Sizedependent fracture toughness of bulk metallic glasses" Acta Mater., 70, pp. 198–207.
- [161] Brink T., Peterlechner M., Rösner H., Albe K., and Wilde G. (2016), "Influence of crystalline nanoprecipitates on shear-band propagation in Cu-Zr-based metallic glasses" Phys. Rev. Applied, 5, p. 054005.
- [162] Greer A. L. and Ma E. (2007), "Bulk metallic glasses: At the cutting edge of metals research" MRS Bull., 32, pp. 611-9.

- [163] Lee M. L., Li Y., and Schuh C. A. (2004), "Effect of a controlled volume fraction of dendritic phases on tensile and compressive ductility in La-based metallic glass matrix composites" Acta Mater., 52, pp. 4121-31.
- [164] Inoue A., Tomioka H., and Masumoto T. (1983), "Mechanical properties of ductile Fe-Ni-Zr and Fe-Ni-Zr (Nb or Ta) amorphous alloys containing fine crystalline particles" J. Mater. Sci., 18, pp. 153-60.
- [165] Pauly S., Das J., Bednarcik J., Mattern N., Kim K. B., Kim D. H., et al. (2009), "Deformation-induced martensitic transformation in Cu–Zr–(Al,Ti) bulk metallic glass composites" Scr. Mater., 60, pp. 431-4.
- [166] Inoue A., Zhang T., Saida J., and Matsushita M. (2000), "Enhancement of strength and ductility in Zr-based bulk amorphous alloys by precipitation of quasicrystalline phase" Mater. Trans., 41, pp. 1511-20.
- [167] Hays C. C., Kim C. P., and Johnson W. L. (2000), "Microstructure controlled shear band pattern formation and enhanced plasticity of bulk metallic glasses containing in situ formed ductile phase dendrite dispersions" Phys. Rev. Lett., 84, pp. 2901-4.
- [168] Hofmann D. C., Suh J. Y., Wiest A., Duan G., Lind M. L., Demetriou M. D., et al. (2008), "Designing metallic glass matrix composites with high toughness and tensile ductility" Nature, 451, pp. 1085–9.
- [169] Das J., Tang M. B., Kim K. B., Theissmann R., Baier F., Wang W. H., et al. (2005), ""Work-hardenable" ductile bulk metallic glass" **Phys. Rev. Lett.**, **94**, p. **205501**.
- [170] Kim J. Y., Jang D., and Greer J. R. (2011), "Nanolaminates utilizing size-dependent homogeneous plasticity of metallic glasses" Adv. Funct. Mater., 21, pp. 4550-4.
- [171] Kim J. Y., Gu X., Wraith M., Uhl J. T., Dahmen K. A., and Greer J. R. (2012), "Suppression of catastrophic failure in metallic glass-polyisoprene nanolaminate containing nanopillars" Adv. Funct. Mater., 22, pp. 1972–80.
- [172] Guo W., Jägle E., Yao J., Maier V., Korte-Kerzel S., Schneider J. M., et al. (2014), "Intrinsic and extrinsic size effects in the deformation of amorphous CuZr/nanocrystalline Cu nanolaminates" Acta Mater., 80, pp. 94-106.
- [173] Ni Z., Bu h., Zou M., Yi H., Bi K., and Chen Y. (2010), "Anisotropic mechanical properties of graphene sheets from molecular dynamics" Physica B, 405, pp. 1301– 6.
- [174] Lewandowski J. J. and Greer A. L. (2006), "Temperature rise at shear bands in metallic glasses" Nat. Mater., 5, pp. 15-18.
- [175] Greer A. L., Cheng Y. Q., and Ma E. (2013), "Shear bands in metallic glasses" Mater. Sci. Eng. R, 74, pp. 71-132.
- [176] Yang B., Morrison M. L., Liaw P. K., Buchanan R. A., Wang G., Liu C. T., et al. (2005), "Dynamic evolution of nanoscale shear bands in a bulk-metallic glass" Appl. Phys. Lett., 86, p. 141904.
- [177] Bei H., Xie S., and George E. P. (2006), "Softening caused by profuse shear banding in a bulk metallic glass" **Phys. Rev. Lett.**, **96**, p. **105503**.
- [178] Albe K., Ritter Y., and Sopu D. (2013), "Enhancing the plasticity of metallic glasses: Shear band formation, nanocomposites and nanoglasses investigated by molecular dynamics simulations" **Mech. Mater.**, **67**, pp. **94-103**.

- [179] Takeuchi S. and Edagawa K. (2011), "Atomistic simulation and modeling of localized shear deformation in metallic glasses" **Prog. Mater. Sci.**, 56, pp. 785–816.
- [180] Tang C. and Wong C. H. (2015), "A molecular dynamics simulation study of solidlike and liquid-like networks in Zr₄₆Cu₄₆Al₈ metallic glass" J. Non-Cryst. Solids, 422, pp. 39-45.
- [181] Li Q. K. and Li M. (2007), "Assessing the critical sizes for shear band formation in metallic glasses from molecular dynamics simulation" Appl. Phys. Lett., 91, p. 231905.
- [182] Gao Y. F., Wang L., Bei H., and Nieh T. G. (2011), "On the shear-band direction in metallic glasses" Acta Mater., 59, pp. 4159-67.
- [183] Kim K. T., Cha S. I., Gemming T., Eckert J., and Hong S. H. (2008), "The Role of interfacial oxygen atoms in the enhanced mechanical properties of carbon-nanotubereinforced metal matrix nanocomposites" Small, 4, pp. 1936–40.
- [184] Georgakilas V., Otyepka M., Bourlinos A. B., Chandra V., Kim N., Kemp K. C., et al. (2012), "Functionalization of graphene: Covalent and non-covalent approaches, derivatives and applications" Chem. Rev., 112, pp. 6156-214.
- [185] Morse, P. M. (1964) "Thermal Physics", 2nd ed., W. A. Benjamin. Inc., New York.
- [186] Adams J. and Foiles S. (1990), " Development of an embedded atom potential for a bcc metal: Vanadium" **Phys. Rev. B**, **41**, pp. **3316-28**.
- [187] Johnson C. and Scott L. (1989), " An analysis of quadrature errors in second-kind boundary integral methods" **SIAM J. Num. Anal.**, 26, pp. 1356-82.
- [188] Baskes M. (1987), " Application of the embedded-atom method to covalent materials: A semiempirical potential for silicon" Phys. Rev. Lett., 59, pp. 2666-9.
- [189] Baskes M., Nelson J. and Wright A. (1989), "Semiempirical modified embeddedatom potentials for silicon and germanium" **Phys. Rev. B**, 40, pp. 6085-6100.
- [190] Abell G. (1985), "Empirical chemical pseudopotential theory of molecular and metallic bonding" **Phys. Rev. B**, **31**, pp. **6184-96**.
- [191] Tersoff J. (1986), "New empirical model for the structural properties of silicon" Phys. Rev. Lett., 56, pp. 632-5.
- [192] Brenner D. (1990), "Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the

```
chemical vapor deposition of diamond films" Phys. Rev. B, 42, pp. 9458-71.
```

- [193] Finnis M. and Sinclair J. (1984), "A simple empirical N-body potential for transition
- metals" Phil. Mag. A, 50, pp. 45-55.
- [194] Griebel M., Knapek S. and Zumbusch G. (2007), "Numerical Simulation in Molecular Dynamics: Numerics, Algorithms, Parallelization, and Applications", Springer.
- [195] Feng Y., Yuan H. L., and Zhang M. (2005), "Fabrication and properties of silvermatrix composites reinforced by carbon nanotubes" Mater. Charact., 55, pp. 211-8.
- [196] Yang J. and Schaller R. (2004), "Mechanical spectroscopy of Mg reinforced with Al2O3 short fibers and C nanotubes," Mater. Sci. Eng. A, 370, pp. 512-5.

- [197] Arcidiacono S., Walther J. H., Poulikakos D., Passerone D., and Koumoutsakos P. (2005), "Solidification of Gold Nanoparticles in Carbon Nanotubes" Phys. Rev. Lett., 94.
- [198] Liao M. L., Lian T. W., and Ju S. P. (2012), "Tensile and Compressive Behaviours of a Boron Nitride Nanotube: Temperature Effects" Mater. Sci. Forum, 700, pp. 125-8.
- [199] Stukowski A. (2010), "Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the Open Visualization Tool" Modell. Simul. Mater. Sci. Eng., 18, p. 015012.
- [200] Diao J., Gall K. and Dunn M. L. (2010), "Atomistic simulation of the structure and elastic properties of gold nanowires" J. Mech. Phys. Solids, 52, pp. 1935-62.
- [201] Mattern N., Bednarcik J., Pauly S., Wang G., Das J., and Eckert J. (2009), "Structural evolution of Cu–Zr metallic glasses under tension" Acta Mater., 57, p. 4133.
- [202] Xu D., Lohwongwatana B., Duan G., Johnson W.L., andGarland C. (2004), "Bulk metallic glass formation in binary Cu-rich alloy series – Cu₁₀₀–*x*Zrx (*x*=34, 36, 38.2, 40 at.%) and mechanical properties of bulk Cu₆₄Zr₃₆ glass" Acta Mater., 52, p. 2621.
- [203] Duan G., Blauwe K., Lind M.L., Schramm J.P., Johnson W.L. (2008), "Compositional dependence of thermal, elastic, and mechanical properties in Cu–Zr– Ag bulk metallic glasses" **Scripta Mater.**, **58**, p. **159**.

First, mechanical properties and deformation mechanism of nano single crystal aluminum are investigated and the applied strain rate and system temperature effects are attained. According to the obtained results, strain rate does no cause considerable effects on the mechanical behavior on the material. But the system temperature makes significant influence. After that BNNT are utilized to reinforce aluminum material and stress-strain curve and influences of the nanotube on the nanocomposite are achieved by modeling tensile and compressive loading tests. Results show high reinforcing effects of the long BNNTs of the matrix. Then a new emerging group of engineering materials, namely nanolayered composites are explored in which alternating layers of metal and graphene are mixed to reinforce various fcc metals, i.e. copper, aluminum, nickel, silver and gold. Graphene addition and also metal layer thickness make significant influence on the compressive deformation mechanism of the composites based on Cu, Au, and Ag matrices.

In the continuation of the research, CNTs are used in order to improve mechanical characteristics of Cu-Zr MGs. Elastic-plastic behavior of the nanocomposite are derived by tensile and compressive loadings. Also the effects of the reinforcement parameters are studied. Long CNT addition significantly improve the mechanical characteristics of MG matrix. Being brittle is one of the intrinsic properties of MGs. Also they have a very low ability in absorbing an applied loading energy. Hence, combining of graphene layers with MG matrices are recommended as a solution to improve their ductility. To do so, long and short graphene nanosheets of different arrangements are utilized to improve the ductility and toughness of MGs. According to the obtained results graphene layers can significantly enhance the ductility and toughness of glassy metals by blocking the propagation of the formed shear bands and by increasing the number of local plastic deformations.

Keywords

Metal, Metallic glasses, Nanocomposites, Carbon nanotube, Boron nitride nanotube, Graphene, Molecular dynamics

Abstract

With the development of nanotechnology, the applications of metallic materials have considerably increased in this new field of technology. Analyzing the mechanical properties and behaviors of metals as one of the constituents of nanodevices and determining the effects of parameters related to loading conditions are essential steps. On the other hand, the researchers have always tried to improve the properties of metal matrix composites by utilizing suitable reinforcements. Nanostructures like carbon nanotubes have been employed to reinforce and enhance the mechanical characteristics of nanocomposites as new engineering materials. It has always been attempted to analyze the properties of nanocomposites by experimental and computational methods and to obtain the effects of nanostructures addition on their mechanical behaviors. With regard to that the experimental methods are expensive and time-consuming in nanomaterials fields, molecular dynamics simulation method as a reliable and accurate computational method can be an appropriate alternative method. In present research, the purposes are to study mechanical properties and deformation mechanism of metals at nanoscale point of view and to investigate mechanical characteristics of nanocomposites reinforced with nanostructures based on molecular dynamics simulations. To do this, carbon nanotubes (CNTs), boron nitride nanotubes (BNNTs) and graphene are employed to combine with metallic matrices in order to improve their mechanical properties. The research which are intended to be performed in this purpose are classified into two distinct categories, namely crystalline metals and metallic glasses (MGs). In the first category, metal matrices have crystalline structures and are reinforced with BNNT and graphene. While, in the second category, the atomic structure of metal matrices is amorphous and they are combined with CNT and graphene with reinforcing purposes.



Shahrood University of Technology Faculty of Mechanical Engineering

PhD Dissertation in Mechanical Engineering – Applied Design

Mechanical Analysis of Metal Matrix Nanocomposites Reinforced with Nanotube and Graphene by Molecular Dynamics simulations

By: Reza Rezaei

Supervisors:

Dr. Mahmoud Shariati Dr. Hossein Tavakoli-Anbaran Dr. Chuang Deng

November 2016